QUANTITATIVE MESSUNG DER DIFFUSEN STREUUNG AN PLAGIOKLASEN (AN_{50} -AN_{75})

Benno Penzkofer

1979

DISSERTATIONS - UND FOTODRUCK FRANK GmbH
8000 München 2, Gabelsbergerstraße 15, Tel. 2809090

QUANTITATIVE MESSUNG DER DIFFUSEN STREUUNG AN PLAGIOKLASEN (AN_{50} - AN_{75})

Dissertation
der Fakultät für Geowissenschaften der
Ludwig-Maximilians-Universität München

eingereicht am
15. Oktober 1979

von

Benno Penzkofer
aus München

UNIV.
LEIDEN
BIBL.

1. Berichterstatter: Prof. Dr. H. Jagodzinski
2. Berichterstatter: Prof. Dr. H. G. Huckenholz

Tag der mündlichen Prüfung: 17. Dezember 1979

Inhaltsverzeichnis

		Seite
Kapitel 1	Plagioklase - eine Herausforderung für Strukturanalytiker	1
1.1.	Einleitung	1
1.2.	Problemstellung	2
1.3.	Übersicht über die Plagioklasstruktur	3
1.3.1.	Beugungscharakteristika im reziproken Raum	4
1.3.2.	Der Aufbau der Elementarzelle	6
1.3.3.	Die Überstruktur der intermediären Plagioklase	8
1.3.3.1.	Das Modell von Chao und Taylor	11
1.3.3.2.	Das Modell von Megaw	11
1.3.3.3.	Das Modell von Korekawa und Jagodzinski	12
1.3.3.4.	Das Modell von Smith und Ribbe	15
1.3.3.5.	Das Modell von Toman und Frueh	15
1.3.3.6.	Das Modell von Cinnamon und Bailey	16
1.3.3.7.	Das Modell von McConnell	17
1.3.3.8.	Das Modell von Kitamura und Morimoto	17
1.3.4.	Größere Überperioden und Heterogenitäten	19
Kapitel 2	Röntgenographische Untersuchungen an intermediären Plagioklasen	21
2.1.	Überblick	21
2.2.	Beschreibung des Untersuchungsmaterials	22
2.2.1.	Auswahl der Kristalle	22
2.2.2.	Chemismus der Proben	24
2.2.3.	Beugungssachverhalt der Proben	26
2.2.4.	Gitterkonstanten	27
2.2.5.	Satellitenvektoren und Überstrukturperioden	28
2.3.	Strukturbestimmung der Proben An_{52} und $An_{78.6}$	29
2.3.1.	Gründe einer neuerlichen Strukturverfeinerung	29
2.3.2.	Messungen	30
2.3.3.	Datenreduktion	31
2.3.4.	Auswertung der Datensätze	31

Seite

2.3.5. Strukturanalyse des Ca-armen Endglieds $Ca_{0.52}Na_{0.48}Al_{1.52}Si_{2.48}O_8$ 32
2.3.5.1. Verfeinerung 32
2.3.5.2. Ergebnisse und ihre Diskussion 33
2.3.6. Strukturanalyse des Ca-reichen Endglieds $Ca_{0.79}Na_{0.21}Al_{1.79}Si_{2.21}O_8$ 33
2.3.6.1. Verfeinerung 33
2.3.6.2. Ergebnisse und ihre Diskussion 34
2.4. Experimentelle Methoden zur Untersuchung der diffusen Reflexe 36
2.4.1. Röntgenmonochromator nach Johansson-Guinier 36
2.4.2. Die Noromosic-Technik 36
2.4.3. Die simulierte Weissenberg-Technik 37
2.5. Die diffusen c- und d-Reflexe 38
2.5.1. Auswahl geeigneter Reflexe 38
2.5.2. Messung der Halbwertsbreiten 40
2.5.3. Abhängigkeit der Halbwertsbreiten und der Domänenbreiten vom Gesamtchemismus 44
2.5.4. Messung der integralen Intensitäten 48
2.5.5. Skalierung der integralen Intensitäten 51
2.5.6. Abhängigkeit der integralen Intensitäten vom Gesamtchemismus 53
2.5.7. Die formalen Teilchengrößen der Ca-reichen Domänen 56
2.6. Die diffusen b-Reflexe 58
2.7. Eine neue Überstruktur bei Plagioklasen 61
2.7.1. Messungen 61
2.7.2. Auswertung der Noromosic-Aufnahmen 63
2.7.3. Ergebnisse und ihre Diskussion 65

Kapitel 3 Diskussion der Modellvorstellungen bei intermediären Plagioklasen unter besonderer Berücksichtigung der Messungen an diffusen c- und d-Reflexen 68
3.1. Übersicht der Meßergebnisse 68
3.2. Klassifizierung der Modelle 69

Seite

3.3. Anmerkung zu den qualitativen Modellen 70

3.4. Vergleich der quantitativen Modelle mit den Ergebnissen dieser Arbeit 71

3.4.1. Diskussion des Modells von Toman und Frueh 71

3.4.2. Diskussion des Modells von Kitamura und Morimoto 71

3.4.3. Diskussion des Modells von Korekawa und Jagodzinski 72

Zusammenfassung 75

Anhang A Röntgenaufnahmen intermediärer Plagioklase (An_{52} - An_{75}) 77

A 1 Noromosic-Aufnahmen 77

A 2 Simulierte Weissenberg-Aufnahmen 81

Anhang B Strukturdaten der Probe An_{52} 87

Anhang C Strukturdaten der Probe $An_{78.6}$ 96

Anhang D Ermittlung der Koordinaten $\pm \delta h$, $\pm \delta k$, $\mp \delta l$ einzelner Satellitenreflexe 114

Anhang E Ermittlung der integralen Intensität eines diffusen Reflexes 117

Anhang F Tabellen 129

Literaturverzeichnis 131

Tabellenverzeichnis

		Seite
1	Überblick über die verwendeten Kristalle	23
2	Chemismus der Proben	24
3	Beugungscharakteristika	26
4	Gitterkonstanten	28
5	Gemittelte Satellitenkoordinaten und Überstrukturperioden	29
6	Liste der untersuchten c- und d-Reflexe	39
7	Domänenbreiten [Å] aus c-, d-Reflexen	46
8	Ermittlung der Stabilitätsgrenze der Ca-reichen Lamelle	47
9	Integrale Intensität der skalierten c-Reflexe	55
10	Grenze der integralen Intensität der c-Reflexe	56
11	Indizierung der Satelliten	64
12	Zellgrößen aus dem Abstand zweier Satelliten	64
13	Vergleich von theoretisch und experimentell bestimmten Teilchengrößen	73
B 1	Strukturparameter (An_{52})	87
B 2	T-O-Bindungslängen (An_{52})	88
B 3	Beobachtete und berechnete Strukturfaktoren für An_{52} (a-Reflexe)	89
C 1	Strukturparameter ($An_{78.6}$)	96
C 2	T-O-Bindungslängen ($An_{78.6}$)	98
C 3	Beobachtete und berechnete Strukturfaktoren für $An_{78.6}$ (a-Reflexe)	100
C 4	Beobachtete und berechnete Strukturfaktoren für $An_{78.6}$ (b-Reflexe)	107
D 1	Satellitenkoordinaten der Probe An_{52}	115
D 2	Satellitenkoordinaten der Probe $An_{58.5}$	115
D 3	Satellitenkoordinaten der Probe $An_{69.7}$	116
D 4	Satellitenkoordinaten der Probe An_{70}	116
D 5	Satellitenkoordinaten der Probe An_{75}	116
E 1	Zweidimensionale Intensitätsschnitte durch den Reflex $(26\bar{7})$	118
E 2	Vergleich von gemessenen und berechneten zweidimensionalen Intensitätswerten	127
F 1	Vergleich von gemittelten Tetraederabständen	129
F 2	Streuanteile der Strukturfaktoren einiger c-, d-Reflexe	130

Abbildungsverzeichnis

		Seite
1	Schematisches Diagramm für das Auftreten der verschiedenen Reflextypen	4
2	Projektion der Anorthitstruktur auf die a-c-Ebene	7
3	Anordnung der Subzellen in der $(100)_0$-Ebene	11
4a	Prinzipskizze der Überstruktur eines An_{50}	13
4b	Prinzipskizze der Überstruktur eines An_{75}	13
5	Überstrukturmodell für einen Gesamtchemismus An_{50}	18
6	Photometerkurven des Reflexes $(\bar{3}5\bar{9})$ der Probe An_{52}	40
7	Photometerkurven des Reflexes $(\bar{3}5\bar{9})$ der Probe $An_{58.5}$	41
8	Photometerkurven des Reflexes $(\bar{3}5\bar{9})$ der Probe $An_{69.7}$	41
9	Photometerkurven des Reflexes $(\bar{3}5\bar{9})$ der Probe An_{70}	42
10	Photometerkurven des Reflexes $(\bar{3}5\bar{9})$ der Probe An_{75}	42
11	Abhängigkeit der Lamellenbreiten vom Gesamtchemismus	44
12	Intensitätsverlauf des Reflexes $(26\bar{7})$ entlang der reziproken Richtung $(0\bar{1}0)$	50
13	Abhängigkeit der integralen Intensität des Reflexes $(26\bar{7})$ vom Gesamtchemismus	54
14	Teilchengrößen der aus c- und d-Reflexen ermittelten Domänen in Richtung der Kristallachsen	57
15a	Umgebung des Reflexes $(3\bar{6}\bar{5})$ der Probe An_{52}	59
15b	Umgebung des Reflexes $(3\bar{6}\bar{5})$ der Probe $An_{58.5}$	59
15c	Umgebung des Reflexes $(3\bar{6}\bar{5})$ der Probe $An_{69.7}$	59
15d	Umgebung des Reflexes $(3\bar{6}\bar{5})$ der Probe An_{70}	59
15e	Umgebung des Reflexes $(3\bar{6}\bar{5})$ der Probe An_{75}	59
16a	Überstrukturreflex (040), An_{50}	61
16b	Überstrukturreflex $(0\bar{4}0)$, An_{70}	61
16c	Überstrukturreflex $(0\bar{4}0)$, An_{75}	61
16d	Überstrukturreflex (004), $An_{97.5}$	61
16e	Überstrukturreflex (040), $An_{78.6}$, Drehachse $[\bar{1}00]$	61

		Seite
16f	Überstrukturreflex (040), $An_{78.6}$, Drehachse [001]	61
17a	Ausschnitt einer Noromosic-Aufnahme der Probe An_{70} zu Beginn der Untersuchungsreihe	62
17b	Ausschnitt einer Noromosic-Aufnahme der Probe An_{70} am Ende der Untersuchungsreihe	62
18	Plot des Reflexes ($0\bar{4}0$) der Probe An_{70}	63
A 1a	Noromosic-Aufnahme der Probe An_{52}	78
A 1b	Noromosic-Aufnahme der Probe $An_{58.5}$	79
A 1c	Noromosic-Aufnahme der Probe $An_{69.7}$	79
A 1d	Noromosic-Aufnahme der Probe An_{70}	80
A 1e	Noromosic-Aufnahme der Probe An_{75}	80
A 2a	Simulierte Weissenberg-Aufnahme (2kl) der Probe An_{52}	82
A 2b	Simulierte Weissenberg-Aufnahme (2kl) der Probe $An_{58.5}$	83
A 2c	Simulierte Weissenberg-Aufnahme (2kl) der Probe $An_{69.7}$	84
A 2d	Simulierte Weissenberg-Aufnahme (2kl) der Probe An_{70}	85
A 2e	Simulierte Weissenberg-Aufnahme (2kl) der Probe An_{75}	86
E 1a	Isointensitätslinien beim Azimutwinkel $\alpha = 106^{\circ}$	119
E 1b	Isointensitätslinien beim Azimutwinkel $\alpha = 108^{\circ}$	120
E 1c	Isointensitätslinien beim Azimutwinkel $\alpha = 110^{\circ}$	121
E 1d	Isointensitätslinien beim Azimutwinkel $\alpha = 112^{\circ}$	122
E 1e	Isointensitätslinien beim Azimutwinkel $\alpha = 114^{\circ}$	123
E 1f	Isointensitätslinien beim Azimutwinkel $\alpha = 116^{\circ}$	124
E 1g	Isointensitätslinien beim Azimutwinkel $\alpha = 118^{\circ}$	125
E 1h	Isointensitätslinien beim Azimutwinkel $\alpha = 120^{\circ}$	126

Kapitel 1

Plagioklase - eine Herausforderung für Strukturanalytiker

1.1. Einleitung

Plagioklase mit der chemischen Formel $(Ca_xNa_{1-x})\,[(Al_{1+x}Si_{3-x})O_8]$, $0 \leq x \leq 1$, gehören zu den wichtigsten gesteinsbildenden Mineralen. Sie sind mit etwa 42 Vol.Prozent am Aufbau der Erdkruste beteiligt. Zusätzlich zu ihrem Auftreten auf der Erde sind sie auch auf dem Mond und in Meteoriten entdeckt worden.

Strukturell muß man die Plagioklase in die Gruppe der Feldspäte und damit zu den Gerüstsilikaten einordnen. Dabei werden die am häufigsten vorkommenden Feldspäte üblicherweise in einem ternären System mit den Eckpunkten Orthoklas ($KAlSi_3O_8$), Albit ($NaAlSi_3O_8$, entspricht An_0, x = 0) und Anorthit ($CaAl_2Si_2O_8$, entspricht An_{100}, x = 1) dargestellt. Während bei hohen Temperaturen nahezu vollständige Mischbarkeit zwischen den Endgliedern Orthoklas-Albit und Albit-Anorthit herrscht, entstehen bei tiefen Temperaturen aus kinetischen und strukturellen Gründen Mischungslücken. Dies führt nun insbesondere bei den Plagioklasen zu Überstrukturen, Antiphasendomänen, Ausscheidungen und in Verbindung mit Pseudosymmetrien zu Verzwilligungen. Zusätzlich weiß man heute, daß die röntgenographischen Beugungsbilder von terrestrischen und lunaren Plagioklasen deutliche Unterschiede, insbesondere in der diffusen Streuung zeigen, so daß auch hier strukturelle Änderungen erwartet werden.

All diese Komplexität führt dazu, daß die Plagioklase zu den Zweistoffsystemen gehören, für die es bis heute kein allgemein gültiges Phasendiagramm gibt. Auch der Einsatz neuerer Untersuchungsmethoden wie die Elektronenmikroskopie, die ergänzende Aussagen zur Röntgen- und Neutronenbeugung liefert, lassen noch eine Reihe von Fragen offen. Selbst die seit wenigen Jahren mögliche

Höchstspannungselektronenmikroskopie mit einem Auflösungsvermögen von nahezu einem Ångström kann aufgrund der Schwierigkeiten in der Interpretation der Kontraste nicht alle Fragestellungen lösen.

Aus diesen Gründen gehören heute die Plagioklase zu den am meisten untersuchten Mineralen und dennoch ist unser Wissen über sie - trotz intensiver Forschung - noch nicht zufriedenstellend.

1.2. Problemstellung

Bereits 1928 wurde von Machatschki /44/ das Bauprinzip der Feldspäte vorausgesagt. Bestätigt wurde es 1933 von Taylor /66/, der einen Sanidin, die monokline Hochtemperaturform des Orthoklas untersuchte. 1934 fanden Taylor, Darbyshire, Strunz /67/ die Struktur des C-zentrierten Tief-Albits, der 1958 von Ferguson, Traill, Taylor /12/ eine Strukturverfeinerung folgte. Die primitive trikline Anorthitstruktur wurde 1962 von Kempster, Megaw und Radoslovich /27/ gelöst. Eine letzte Überprüfung der Anorthitstruktur unter Berücksichtigung möglicher Alternativen erfolgte 1978 von Kalus /26/.

Die oben erwähnte Komplexität der Plagioklase und die damit verbundenen Schwierigkeiten bei der Interpretation der Beugungsbilder (Überstrukturreflexe, diffuse Streuung, Aufspaltung von Reflexen) führten dazu, daß bis heute acht, zum Teil aufeinander aufbauende Strukturmodelle existieren, die für den Bereich der intermediären Plagioklase gelten. Intermediäre Plagioklase sind durch das Auftreten von e- und f-Satelliten (eine genaue Definition siehe Abschnitt 1.3.1.) charakterisiert.

Während ein Teil der Autoren nur qualitative Angaben bezüglich der Überstruktur der intermediären Plagioklase machten, berech-

neten andere Autoren - was auch erst durch die verfeinerten Aufnahmetechniken und die gesteigerte Leistungsfähigkeit moderner Digitalrechner ermöglicht wurde - die Atomanordnung nicht nur in der Elementarzelle, sondern auch in der Überstruktur. Dabei wurde die diffuse Streuung aufgrund ihrer schwierigen Nachweisbarkeit und Auswertung bisher höchstens qualitativ als Informationsquelle herangezogen.

Ziel dieser Arbeit ist es nun, die diffuse Streuung bei intermediären Plagioklasen quantitativ zu erfassen und auszuwerten. Dabei beschränkt sie sich auf den Bereich An_{50} - An_{75} ($0.5 \leq x \leq 0.75$), da hier gut definierte Überperioden infolge der Schärfe der Satelliten zu erwarten sind.

Vorliegende Arbeit ist in drei Kapitel unterteilt.
Im ersten Kapitel werden die wichtigsten Charakteristika der Plagioklase und die verschiedenen Strukturmodelle aufgezeigt. In Kapitel zwei sind die Messungen der diffusen Streuung, die nur mit speziellen Aufnahmetechniken durchzuführen waren, und deren Ergebnisse ausgeführt. Dabei wurde ein neuer Typ von Satellitenreflexen entdeckt. Außerdem wurden Strukturverfeinerungen der beiden Glieder An_{52} und $An_{78.6}$ durchgeführt. Im dritten Kapitel werden die Ergebnisse der Messungen verglichen mit den Strukturvorschlägen.

1.3. Übersicht über die Plagioklasstruktur

Eine Zusammenfassung eines großen Teils bis zum Jahre 1974 veröffentlichter Arbeiten über die Plagioklase sind in den Büchern von Smith /62,63/ und MacKenzie und Zussmann /28/ enthalten.

1.3.1. Beugungscharakteristika im reziproken Raum

Die gesamten Ordnungs-Unordnungsprobleme der Plagioklase und die damit verbundenen Erscheinungen wie Entmischungen, Antiphasendomänen, Überstrukturen spiegeln sich in den Beugungsbildern wieder. Neben den Grundgitterreflexen (Bragg-Reflexe) findet man eine Reihe von Überstrukturreflexen (Satelliten), die auf verschiedene Überperioden zurückzuführen sind. Eine schematische Darstellung über die Verteilung der Reflextypen bei Tieftemperaturplagioklasen ist in Abb. 1 gegeben.

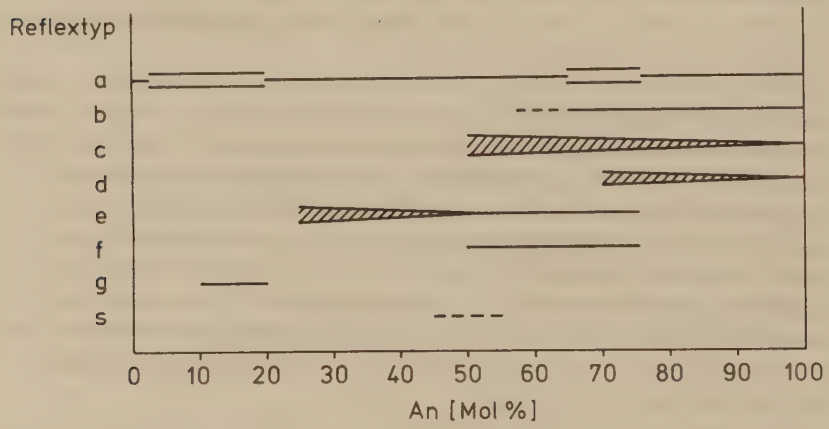

Abb. 1: Schematisches Diagramm für das Auftreten der verschiedenen Reflextypen (abgewandelt und ergänzt; Originalbild siehe Smith und Ribbe /61/).

Die Verdoppelung der Linie a (a-Reflexe) in Abb. 1 weist auf eine lamellare Verwachsung von zwei Plagioklasen unterschiedlichen Chemismus hin, wobei die Breite der Lamellen auf wenige Gitterkonstanten beschränkt sein kann. Bei den Ca-reichen Plagioklasen (etwa An_{70}) erstreckt sich die Verdoppelung vermutlich bis An_{50}. Sie kann nur aufgrund der starken Kohärenz und der ähnlichen Geometrie beider Phasen röntgenographisch

nicht nachgewiesen werden. Es werden jedoch in Elektronenbeugungsbildern aufgespaltene Kikuchi-Linien bei Labradoriten, d. h. Plagioklasen mit einem Gesamtchemismus von etwa An_{50} beobachtet /57/. Die gestrichelten Linien (b-Reflexe, s-Satelliten) deuten auf ein unregelmäßiges Auftreten der Reflexe infolge Fehlordnung oder Genese hin. Die zunehmende Diffusität der Reflextypen (c, d, e) mit fallendem An-Gehalt wird durch eine Verbreiterung der schraffierten Bereiche dargestellt. Es ist anzunehmen, daß die d-Reflexe analog zu den c-Reflexen bis etwa An_{50} auftreten. Der bisher fehlende Nachweis scheitert mit hoher Wahrscheinlichkeit an der sehr geringen Intensität dieser Reflexgruppe.

Für die heute übliche Klassifikation der Reflextypen beziehen wir uns auf eine Anorthitzelle mit den Gitterkonstanten $a \sim 8.18$ Å, $b \sim 12.87$ Å, $c \sim 14.17$ Å, $\alpha \sim 93.12°$, $\beta \sim 115.91°$, $\gamma \sim 91.27°$. Gegenüber der Albitzelle ist dabei die c-Gitterkonstante aufgrund der Al/Si-Verteilung verdoppelt.

Folgende Reflexgruppen werden unterschieden:

a-Reflexe: $h + k = 2n,\ l = 2n$
b-Reflexe: $h + k = 2n + 1,\ l = 2n + 1$
c-Reflexe: $h + k = 2n,\ l = 2n + 1$
d-Reflexe: $h + k = 2n + 1,\ l = 2n.$

Die c- und d-Reflexe wurden früher von Laves und Goldsmith /40/ aufgrund ähnlicher Beugungscharakteristika nur c-Reflexe genannt.

Es folgt die Gruppe der Satelliten:

e-Satelliten: $h \pm \delta h,\ k \pm \delta k,\ l \mp \delta l$ mit $h + k = 2n + 1,\ l = 2n + 1$
f-Satelliten: $h \pm 2\delta h,\ k \pm 2\delta k,\ l \mp 2\delta l$ mit $h + k = 2n,\ l = 2n$
g-Satelliten: $h,\ k \mp \frac{1}{10},\ l$ mit $h + k = 2n,\ l = 2n$
s-Satelliten: $h \pm \delta' h,\ k \mp \delta' k,\ l \pm \delta' l$ mit $h + k = 2n,\ l = 2n.$

1.3.2. Der Aufbau der Elementarzelle

Das allen Feldspäten zugrunde liegende Bauprinzip eines Gerüstsilikats läßt sich anhand der Verknüpfung von Tetraedern ableiten. Diese Tetraeder, als kleinste Baueinheiten mit Si- oder Al-Atomen (kurz T-Atome) in der Mitte und Sauerstoffatomen an den Ecken sind in alle Richtungen mit benachbarten Tetraedern über Ecken verbunden. Dabei wird das Aneinanderstoßen zweier mit Al-Atomen besetzten Tetraeder nach einer von Löwenstein 1954 /43/ in erster Linie empirisch begründeten Regel vermieden. Die Sauerstoffatome des Gerüsts bilden unregelmäßig geformte Käfige, in denen als Ladungsausgleich zu dem TO_2-Gitter Kationen (M-Atome) wie Kalium, Natrium, Kalzium sitzen. Die Koordination der M-Atome bezüglich der Sauerstoffatome hängt in starkem Maße von den Ionenradien ab. Im Gegensatz zum großen Kaliumion, das die Käfige ausfüllt (Koordinationszahl 9), verzerren die kleinen Natrium- und Kalziumionen ihre Umgebung und streben zur Koordinationszahl 6 oder 7.

Während beim Albit - abgesehen von stark überbelichteten Aufnahmen - nur scharfe a-Reflexe auftreten, d. h. die Struktur ist bezüglich der primitiven Anorthitaufstellung C-flächenzentriert und c-kantenzentriert (halbe Gitterlänge von c), werden beim Anorthit a-, b-, c-, d-Reflexe beobachtet. Da, wie aus Abb. 1 zu ersehen ist, in dem in dieser Arbeit vornehmlich interessierenden Bereich von An_{50} - An_{75} alle vier Reflexgruppen auftauchen, wird im folgenden die Anorthit-Struktur ausführlicher behandelt.

Ein Ausschnitt aus der Anorthit-Struktur wird in Abb. 2 dargestellt.

Abb. 2: Projektion der Anorthit-Struktur auf die a-c-Ebene. Nur Atome mit y = ± 0.3 sind eingezeichnet. Aus Wainwright und Starkey /74/. Die Notation der Atome ist der Arbeit von Megaw /45/ entnommen.

Die Einheitszelle des Anorthits läßt sich aus vier ähnlichen, jedoch nicht identischen Teilzellen aufbauen. Diese sind untereinander mit den Verschiebungsvektoren 1/2[110] (C-flächenzentriert), 1/2 [001] (c-kantenzentriert) und 1/2 [111] (innenzentriert) verbunden. Obwohl jede Teilzelle zwei Formeleinheiten $CaAl_2Si_2O_8$ enthält, bestehen doch kleine Abweichungen in den Atomkoordinaten. Zusätzlich besitzen die Paare von Teilzellen, die durch die Vektoren 1/2 [110] und 1/2 [001] überführt werden, eine vertauschte Anordnung von Si- und Al-Atomen.

Vernachlässigt man die Unterschiede der Teilzellen, d. h. berücksichtigt man nur die Mittelwerte der durch die Verschiebungsvektoren verbundenen Atome, gelangt man zur sogenannten gemittelten Struktur. Diese besitzt gegenüber der Anorthit-Struktur mit der Raumgruppe $P\bar{1}$ und $c \sim 14.2$ Å die erhöhte Symmetrie $C\bar{1}$ mit $c \sim 7.1$ Å und wird allein durch die a-Reflexe dargestellt. Die Differenzvektoren, die die Abweichungen in den Atomkoordinaten vom gemittelten Wert bezüglich der vier Teilzellen angeben, werden durch die b-, c-, d-Reflexe beschrieben. Jedoch sind diese Abweichungen klein, da die a-Reflexe die überwiegende Intensität besitzen.

Mit steigendem Albit-Gehalt ($1 \geq x \geq 0.8$) wird eine zunehmende Diffusität der Reflexe $h + k + l = 2n + 1$, d. h. der c- und d-Reflexe beobachtet. Dieser Zusammenhang wurde schon frühzeitig (1954) von Laves und Goldsmith /41/ festgestellt. Eine genaue Analyse, die infolge von Fehlern in der Si/Al-Sequenz auf Antiphasendomänen mit dem Verschiebungsvektor $1/2\,[111]$ führt, wurde jedoch erst 1976 von Jagodzinski und Korekawa /21/ durchgeführt. Nach neuesten Untersuchungen von Adlhart, Frey und Jagodzinski /2/ sind bei geringen Albit-Beimengungen ($0.975 \geq x \geq 0.954$) auch dynamische Effekte (Phononen) an den Verbreiterungen der Reflexe beteiligt.

1.3.3. Die Überstruktur der intermediären Plagioklase

Plagioklase im Bereich von etwa An_{25} - An_{80} sind durch das Auftreten von e-Satelliten charakterisiert. Mit steigendem Anorthit-Gehalt werden ab etwa An_{50} zusätzlich noch f-Satelliten beobachtet. Während die e-Satelliten häufig symmetrisch um die Plätze der b-Reflexe liegen, treten die f-Satelliten in gleicher reziproker Richtung, jedoch mit doppeltem Abstand um die Orte der a-Reflexe auf. Benachbarte Satelliten zeigen häufig Intensitäts-

asymmetrien. Selbst bei hohen Glanzwinkeln werden nur Satelliten niedriger Ordnung (erster, zweiter, dritter Ordnung) beobachtet.

Eine Analyse der Satelliten zeigt, daß diese ihre Lage und ihren Abstand im reziproken Raum in charakteristischer Weise mit variierendem Gesamtchemismus ändern. Bereits 1956 wies Gay /14/ durch Untersuchung an etwa 40 intermediären Plagioklasen nach, daß sich die Werte δa, δb, δc[+)] mit steigendem An-Gehalt nahezu linear ändern.

Genaue Messungen der Brechungsindizes, des reziproken Winkels γ^* und der Satellitenkoordinate δc durch Doman, Cinnamon, Bailey /11/ wiesen jedoch auf Diskontinuitäten bei etwa An_{30} und An_{50} hin. Diese Unstetigkeiten wurden auch von Jagodzinski und Korekawa /21/ an gemittelten Atomkoordinaten, insbesondere der Ca/Na-Punktlage bestätigt.

Errechnet man die Überstrukturperiode $T = \frac{1}{|\vec{t}|}$ aus dem reziproken Vektor $\vec{t}$, der definiert ist als

$$\vec{t} = 2 \cdot (\delta h \vec{a}^* + \delta k \vec{b}^* - \delta l \vec{c}^*),$$

wobei $\vec{a}^*$, $\vec{b}^*$, $\vec{c}^*$ die Basisvektoren der reziproken Elementarzelle darstellen, ergibt sich eine kontinuierliche Änderung der Periode von $T \sim 20$ Å bei etwa An_{30} bis $T \sim 70$ Å bei etwa An_{75}. Dabei bezieht sich obige Gleichung auf den Abstand zweier e-Satelliten oder den Abstand a-Reflex - f-Satellit. Aus der Orientierung der e- bzw. f-Satellitenpaare läßt sich die Lage der Domänengrenze ermitteln. Sie dreht sich von $(10\bar{4})$ bei etwa An_{25} über $(11\bar{4})$ bei etwa An_{50} zu $(13\bar{4})$ bei etwa An_{75}. 1963 wurden

---

+) Die heute üblicherweise angegebenen Koordinaten im reziproken Raum δh, δk, δl ergeben sich durch Umrechnung aus den früher verwendeten, aus Schwenk- oder Drehkristallaufnahmen entnommenen Werten δa, δb, δc wie folgt: $\delta h = \frac{\delta a}{360^\circ}$, $\delta k = \frac{\delta b}{360^\circ}$, $\delta l = \frac{180-\delta c}{180^\circ}$.

diese Überperioden erstmals elektronenmikroskopisch von McConnell und Fleet /7/ abgebildet.

Für den Bereich der intermediären Plagioklase wurden bis heute acht Strukturvorschläge entwickelt. Im folgenden werden nur die zentralen Gedanken der einzelnen Autoren dargelegt. Eine ausführliche Darstellung entnehme man den Originalarbeiten.

Chronologisch werden die Theorien folgendermaßen geordnet:

a) Chao und Taylor (1940) /5/

b) Megaw (1960) /46,47,48/

c) Korekawa und Jagodzinski (1967) /33/
Mit Erweiterungen des Modells durch Korekawa, Horst /35,36/, Jagodzinski und Korekawa /23/. Eine quantitative Berechnung dieses Modells erfolgte durch Korekawa, Horst, Tagai /37,38/.

d) Smith und Ribbe (1969) /61/

e) Toman und Frueh (1971) /68/
Weiterführende Arbeiten in den darauf folgenden Jahren durch Toman und Frueh /69,70,71/. Eine Strukturverfeinerung ihres Modells wurde durchgeführt /72,73/.

f) Cinnamon und Bailey (1971) /6/

g) McConnell (1972) /8/

h) Kitamura und Morimoto (1975) /29/
Eine quantitative Berechnung dieses Modells wurde von den Autoren unternommen /30/.

1.3.3.1. Das Modell von Chao und Taylor

Anhand eines optischen Analogons leiteten Chao und Taylor ihr Modell ab. Sie vermuteten, daß die intermediären Plagioklase aus Lamellen bestehen, die albit- und anorthitähnliche Struktur besitzen. Die Lamellen sind jeweils einige Einheitszellen dick und sind parallel (001) angeordnet.

1.3.3.2. Das Modell von Megaw

Megaw entwickelte das Modell eines "idealen" Plagioklases mit einem Gesamtchemismus von An_{78}.

Die Überzelle besteht aus 18 Subzellen mit einer Gesamtgröße von $\vec{a}_O \times 9\vec{b}_O \times 2\vec{c}_O$.

Dabei ergeben sich die neuen Gitterkonstanten $\vec{a}_O$, $\vec{b}_O$, $\vec{c}_O$ aus einer primitiven Anorthitzelle $\vec{a}_{An}$, $\vec{b}_{An}$, $\vec{c}_{An}$ wie folgt:

$$\begin{pmatrix} \vec{a}_O \\ \vec{b}_O \\ \vec{c}_O \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \cdot \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 3 & 1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \vec{a}_{An} \\ \vec{b}_{An} \\ \vec{c}_{An} \end{pmatrix}$$

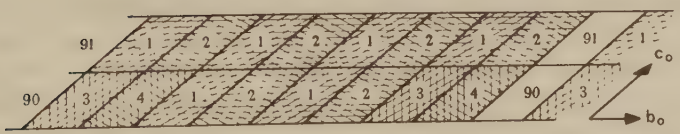

Abb. 3: Anordnung der Subzellen in der $(100)_O$-Ebene, aus Megaw /48/. (Gitterkonstanten wurden ergänzt).

Die Subzellen 1, 2, 3, 4 in Abb. 3 entsprechen den durch Verschiebungsvektoren entstandenen Teilzellen des reinen Anorthits. Als Brücken zum nächsten anorthitähnlichen Block dienen die Zellen 90, 91, die im Gegensatz zur Al/Si-Ordnung des Anorthits den im Gesamtchemismus An_{78} vorhandenen Überschuß an Si enthalten.

Außerhalb des Gesamtchemismus der "idealen" Plagioklasstruktur werden Stapelfehler eingebaut, die oberhalb eines An-Gehalts von An_{50} aufgrund der Schärfe der Satelliten regelmäßig auftreten, während sie unterhalb An_{50} mit zunehmender Diffusität der e-Satelliten statistisch erscheinen.

1.3.3.3. Das Modell von Korekawa und Jagodzinski

Die Autoren schlugen 1967 /33/ für den Labradorit (An_{50}) ein Überstrukturmodell vor, das in erster Näherung aus gleich langen, alternierenden Ketten mit Ca-Atomen und Na-Atomen besteht (Dichtewelle). Aufgrund der Intensitätsverteilung der e- und f-Satelliten im reziproken Raum werden Dichte- und Verschiebungsmodulationen gefordert. Infolge der Ca/Na-Verteilung erhält man in Richtung [001] Antiphasendomänen mit den Breiten T_L, T'_L von ungefähr 28 Å, deren Grenzen etwa parallel zu $(11\bar{4})$ liegen.

Eine schematische Modellvorstellung wird in Abb. 4a gegeben.

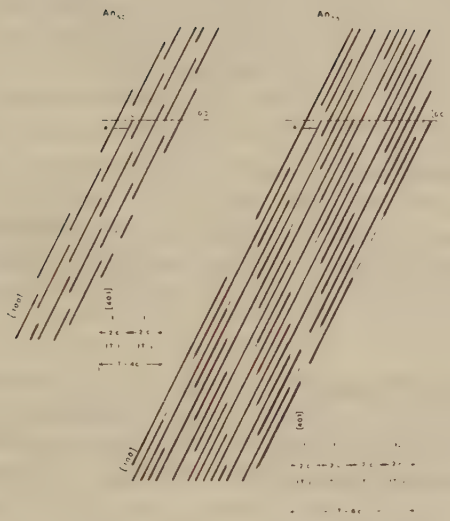

Abb. 4a, b: Prinzipskizzen der Überstruktur eines $An_{50}(An_{75})$. Die dicken Linien entsprechen Reihen von Ca-Paaren, die dünnen Linien Reihen von Na-Paaren. Die Richtung [401] liegt in der Ebene $(11\bar{4})$. Gegenseitige Phasenverschiebungen der Dichtewellen (Ca, Na) sind nicht eingezeichnet, aus Jagodzinski und Korekawa /21/.

Mit steigendem Anorthit-Gehalt werden die Ca-Ketten verlängert (Abb. 4b). Dadurch wird ein Gebiet ausgebildet, in dem nur Ca-Ketten, d.h. eine anorthitähnliche Struktur existiert. Da die Länge der Na-Ketten unverändert bleibt, wird ein lamellares Wachstum von Labradorit (T_L, T_L') und Anorthit bzw. anorthitähnlichen Baueinheiten (T_B, T_B') erzeugt. Aus theoretischen

Überlegungen /21/ werden für die Lamellen T_B, T'_B Anorthit-Gehalte von $An_{97 \pm 3}$ gefordert. Unterhalb eines Gesamtchemismus von An_{50} wird erhebliche Fehlordnung aufgrund der Diffusität der e-Satelliten erwartet. Die Periodizität der Überstruktur ist nicht mehr in vollem Maß gegeben.

Um die Intensitätsasymmetrien der Satelliten erklären zu können, wurden in dieses Modell von Korekawa und Horst /35,36/ Phasenverschiebungen φ der Dichtewellen mit $\varphi \sim 0.19$ eingearbeitet. Dadurch entstehen ungeordnete Zwischenzonen, die das direkte Aneinandergrenzen von Antiphasendomänen verhindern. Diese Zwischenzonen könnten aufgrund sterischer Spannungen gebildet worden sein.

Anstelle der Ca- und Na-Ketten wurden von Jagodzinski und Korekawa 1978 /23/ Strukturmotive ρ_1 und ρ_2 eingeführt, die analog der dicken und dünnen Linien in Abb. 4a angeordnet sind. Eine Strukturverfeinerung dieser Motive, die aus MT_4O_8-Einheiten bestehen, wurde von Korekawa, Horst und Tagai /37,38/ durchgeführt. Sie erbrachte mit a- und e-Reflexen unter Einbeziehung der ausgelöschten Reflexe einen R-Faktor[+)] von R = 0.047 ($R_{a\text{-Ref.}} = 0.028$, $R_{e\text{-Sat.}} = 0.21$).

Diesen Motiven ρ_1 und ρ_2 werden nun Strukturfaktoren $F_1(hkl)$ und $F_2(hkl)$ zugeordnet. Es kann abgeleitet werden /23,24/, daß die Intensitäten der Hauptreflexe abhängen von $|\bar{F}|^2$ und die der e- und f-Satelliten von $|\Delta F|^2$, wobei gilt:

$$\bar{F} = \frac{1}{2}(F_1 + F_2) \quad \text{und} \quad \Delta F = \frac{1}{2}(F_1 - F_2).$$

[+)] Der ungewichtete Residual-Faktor R ist definiert als

$$R = \frac{\sum ||F_O| - |F_C||}{\sum |F_O|},$$

wobei F_O (F_C) die beobachteten (berechneten) Strukturfaktoren bedeuten.

Dieses generalisierte Modell ist in dieser Form in guter Übereinstimmung mit den röntgenographischen Ergebnissen. Mit ihm können der Intensitätsverlauf der e- und f-Satelliten in Abhängigkeit des Gesamtchemismus beschrieben werden. Es erklärt neben den Intensitätsasymmetrien der Satelliten als einziges Modell die Auslöschungen der Satelliten höherer Ordnung (etwa 20000) und deutet zwanglos die Ergebnisse dieser Arbeit.

1.3.3.4. Das Modell von Smith und Ribbe

Im Gegensatz zu dem Modell von Korekawa und Jagodzinski ist dieses Modell nur qualitativer Art. Die Autoren schlagen, ähnlich wie Chao und Taylor (siehe 1.3.3.1.) eine alternierende Anordnung von Albit- und Anorthit-Einheiten vor. Während die Albit-Lamelle eine konstante Größe beibehält, verbreitert sich die Anorthit-Lamelle mit steigendem Gesamtchemismus. Albit- und Anorthit-Gebiete sind voneinander durch Übergangszonen getrennt.

1.3.3.5. Das Modell von Toman und Frueh

Toman und Frueh untersuchten einen Labradorit mit einem Gesamtchemismus von etwa An_{55}. Mit Hilfe von Pattersonsynthesen aus e- und f-Satelliten und Faltungen konnten sie Amplituden und Phasen von Verschiebungswellen für die verschiedenen Atome angeben. Anhand von Bindungslängen diskutierten sie die Anordnung der Ca/Na- und Al/Si-Atome. Eine partielle Ordnung der Ca/Na-Atome wird vorgeschlagen.

Eine Strukturverfeinerung /68/ mit a-, e-, f-Reflexen ergab für a-Reflexe den R-Faktor $R_{a\text{-Ref.}} = 0.071$, für e-Satelliten $R_{e\text{-Sat.}} = 0.215$ und für f-Satelliten $R_{f\text{-Sat.}} = 0.27$. Bei der Strukturverfeinerung wurden jedoch nicht die zahlreichen Aus-

löschungen der Satelliten berücksichtigt.

Dieses Modell ist aus Domänen aufgebaut, die entweder zentrosymmetrisch oder azentrisch angeordnet sind. Im zentrosymmetrischen Fall sind die zentrosymmetrischen Domänen durch den Verschiebungsvektor $\frac{1}{2}[001]$ miteinander verbunden. Im azentrischen Modell wird aber auch ein Inversionszentrum vorgetäuscht, da hier azentrische Domänen durch ein Symmetriezentrum verbunden sind. Die Strukturdaten sind mit beiden Möglichkeiten in Einklang zu bringen.

Die Domänen selbst bestehen aus anorthit- und albitähnlichen Einheiten mit Übergangszonen und sind etwa 63 Å breit.

1.3.3.6. Das Modell von Cinnamon und Bailey

In Analogie zu Überperioden in Metallegierungen, bei denen Satelliten auftreten, werden die intermediären Plagioklase als ein 3-dimensionales Antiphasensystem interpretiert. Aus den Projektionen der Satelliten entlang der kristallographischen Hauptachsen werden durchschnittliche Domänengrößen M_a, M_b, M_c ermittelt. Cinnamon und Bailey stellen im Gegensatz zu allen anderen Autoren die These auf, daß die Domänen entlang der Hauptachsen als unabhängig betrachtet werden können.

Aus der Tatsache, daß Domänengrenzen Gebiete hoher Energie darstellen, leiten sie aus der Zahl der Domänengrenzen pro Einheitsvolumen Stabilitätskriterien der intermediären Plagioklase ab.

Qualitativ erwarten sie ein Antiphasendomänenmodell, in dem benachbarte Domänen strukturelle und chemische Unterschiede zeigen.

1.3.3.7. Das Modell von McConnell

Anhand von hydrothermalen Experimenten versucht McConnell, Aussagen über die Stabilitätsbereiche der intermediären Plagioklase zu treffen.

Er vermutet, je nach der Genese der untersuchten Materialien, stabile bzw. metastabile Zustände. Spinodale Entmischungen und Ausscheidungen werden für wahrscheinlich gehalten.

Keine Angaben werden von McConnell zur Kristallstruktur der intermediären Plagioklase gemacht.

1.3.3.8. Das Modell von Kitamura und Morimoto

Kitamura und Morimoto führten eine neue Zelle mit den Achsen $\vec{a}(An_c)$, $\vec{b}(An_c)$, $\vec{c}(An_c)$ ein, die in engem Zusammenhang zu der Zelle von Megaw (siehe 1.3.3.2.) steht. Die Transformationsmatrix bezüglich dieser Megaw'schen Zelle mit den Achsen $\vec{a}_O$, $\vec{b}_O$, $\vec{c}_O$ lautet:

$$\begin{pmatrix} \vec{a}(An_c) \\ \vec{b}(An_c) \\ \vec{c}(An_c) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m+n & -2n & 0 \\ 0 & 9 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \vec{a}_O \\ \vec{b}_O \\ \vec{c}_O \end{pmatrix}$$

Dabei gilt:
$\frac{m}{n} = (c - 25) \cdot (75 - c)$, wobei m, n ganze Zahlen sind und c den Anorthit-Gehalt in Mol-Prozent wiedergibt.

Bezieht man die Zelle von Kitamura und Morimoto auf die primitive Anorthit-Zelle mit den Achsen $\vec{a}_{An}$, $\vec{b}_{An}$, $\vec{c}_{An}$, erhält man folgende Transformationsgleichungen:

$$\begin{pmatrix} \vec{a}(An_c) \\ \vec{b}(An_c) \\ \vec{c}(An_c) \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \cdot \begin{pmatrix} 2m & -2n & 0 \\ 9 & 9 & 0 \\ 3 & 1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \vec{a}_{An} \\ \vec{b}_{An} \\ \vec{c}_{An} \end{pmatrix}$$

In diesen neuen Aufstellungen sind die e- und f-Satelliten nicht mehr den b- und a-Reflexen zugeordnet, so daß die Autoren e_1- und e_2-Satelliten definieren.

Ihr Modell wird aus einer Verschiebungswelle der Periode M und einer Dichtewelle der Periode $\frac{M}{2}$ erhalten. Die e_1-Satelliten werden der Verschiebungs- und die e_2-Satelliten der Dichtewelle zugeordnet.
Eine schematische Abbildung ihres Modells ist in Abb. 5 gegeben.

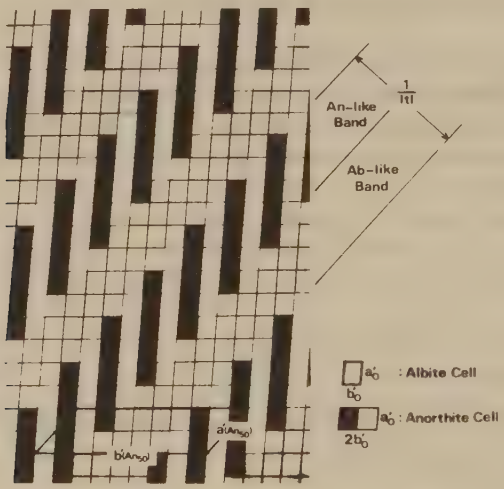

Abb. 5: Überstrukturmodell für einen Gesamtchemismus An_{50}. Die a'_0- und b'_0-Achsen sind Projektionen der Megaw'schen $\vec{a}_0$- und $\vec{b}_0$-Achsen entlang der $\vec{c}_0$-Achse. Weiße und schwarze Anorthit-Zellen sind in Antiphasenstellung. Aus Kitamura und Morimoto /30/.

Nach ihren Untersuchungen bestehen die intermediären Plagioklase aus einer alternierenden Anordnung von albit- und anorthitähnlichen Lamellen. Im Gegensatz zu den Anorthit-Zellen besitzen die Albit-Zellen keine Antiphasenbeziehung. Zwischen den Lamellen existieren keine Übergangszonen. Die chemische Zusammensetzung der Lamellen beträgt etwa An_5 und An_{80} /49/.

Eine Strukturverfeinerung eines An_{73} mit a- und e_1-Reflexen wurde durchgeführt. Dabei wurde der erzielte R-Faktor nicht getrennt für a- und e_1-Reflexe angegeben. Der gemittelte Wert beträgt R = 0.24 für die beobachteten und R = 0.31 unter Berücksichtigung der ausgelöschten Reflexe.

1.3.4. Größere Überperioden und Heterogenitäten

Zusätzlich zu der durch e- und f-Satelliten charakterisierten Überstruktur werden bei bestimmten chemischen Zusammensetzungen größere Perioden beobachtet. Diese Perioden sind bei etwa An_{50} als Bøggild-Verwachsung und bei etwa An_{75} als Huttenlocher-Verwachsung bekannt.

Die Bøggild-Verwachsung besteht aus Lamellen mit Dicken von etwa 1000 Å, die sich in ihrer chemischen Zusammensetzung unterscheiden /52/. Als wahrscheinlichster Wert des gemittelten Chemismus beider Lamellen wird etwa An_{40} und An_{60} angenommen /53,56/. Elektronenmikroskopische Aufnahmen von McConnell /9/ und Hashimoto et al. /15/ zeigen, daß die Übergitter, die durch e- und f-Satelliten charakterisiert sind, in beiden Lamellen vorhanden sind. Untersuchungen von McLaren und Marshall /39/ konnten jedoch diese Übergitter nur in einer Lamelle nachweisen.

Korekawa und Jagodzinski /17,33/ beobachteten bei schillernden Labradoriten in hoch auflösenden Beugungsbildern Supersatelliten (s-Satelliten), die auf diese Lamellen zurückzuführen sind.

Innerhalb dieser Lamellen taucht in Dunkelfeldaufnahmen noch eine Domänentextur mit Abständen von einigen hundert Ångström auf /15/.

Die Huttenlocher-Verwachsung wird analog zur Bøggild-Verwachsung als Entmischung zweier Plagioklase mit den ungefähren Zusammensetzungen An_{67} und An_{85} gedeutet /54/. Dabei dürfte die Dicke und Periodizität der Phasen stark von der Genese des Materials abhängen. Es werden Lamellenbreiten von etwa 120 Å /55/ bis etwa 3000 Å /54/ beobachtet.

Die Ursache und das auslösende Moment für die Entstehung dieser Lamellen sind bis heute höchst spekulativ. Allgemein wird angenommen, daß sich zuerst die Lamellen infolge von spinodaler Entmischung oder auch echter Ausscheidung ausbilden. In diesen Lamellen entwickeln sich dann die durch e- und f-Satelliten charakterisierten Überstrukturen.

Kapitel 2

Röntgenographische Untersuchungen an intermediären Plagioklasen

2.1. Überblick

Die diffuse Streuung bei intermediären Plagioklasen ist im allgemeinen so schwach, daß zu ihrer quantitativen Messung an Einkristallen nicht die "üblichen" Methoden wie Einkristalldiffraktometrie oder Präzession-, Weissenberg- bzw. Schwenkverfahren angewendet werden können. Es müssen Techniken herangezogen werden, die hohe Überbelichtungen ermöglichen. Als geeignete Mittel haben sich hier die sogenannte Noromosic- und die simulierte Weissenberg-Technik erwiesen. Beide Verfahren werden in Abschnitt 2.4.2. und 2.4.3. beschrieben.

Mit Hilfe dieser Verfahren wurden intermediäre Plagioklase im Bereich von An_{50} - An_{80} untersucht. Es wurden integrale Intensitäten von c- und Halbwertsbreiten von c- und d-Reflexen ermittelt und deren Änderungen in Abhängigkeit des Chemismus studiert. Um eine gute Skalierung der Kristalle untereinander zu erreichen (genaue Strukturfaktoren der a-Reflexe werden benötigt), wurden von den beiden Endgliedern der Serie Strukturverfeinerungen mit den scharfen a-, bzw. a- und b-Reflexen durchgeführt. Dabei wurde für die Strukturverfeinerung auf der anorthitreichen Seite ein Plagioklas ohne e- und f-Satelliten ausgewählt (im folgenden: Probe $An_{78.6}$ (Kristall N26 K2)), da bei Ca-reichen Kristallen mit Satelliten Überlagerungen von a-Reflexen, die beiden Phasen zuzuordnen sind, Überlappungen von a- und f- bzw. b- und e-Reflexen an mehreren Stellen des reziproken Gitters auftreten und somit die Strukturanalyse verfälschen würden. Dieser Kristall wurde jedoch für die Untersuchung der diffusen Streuung nicht weiter verwendet. Die Strukturbestimmung eines Kristalls mit der Zusammensetzung von etwa An_{80} war auch insofern von Interesse, da hier noch keine Verfeinerung mit anisotropen Temperaturfaktoren bekannt war.

Im Rahmen der Untersuchung der diffusen c- und d-Reflexe wurde erstmalig um a-Reflexe ein Überstrukturmuster entdeckt. Da diese Überstrukturreflexe zumindest auf der Ca-reichen Seite auch außerhalb des Bereiches der intermediären Plagioklase zu finden waren, wurden unter diesem Gesichtspunkt anhand einiger Kristalle Untersuchungen bis zum reinen Anorthit (An_{100}) ausgedehnt. Diese Messungen haben jedoch im wesentlichen deskriptiven Charakter.

Der Schwerpunkt dieser Arbeit liegt in der quantitativen Messung und Interpretation der diffusen Streuung von c- und d-Reflexen.

2.2. Beschreibung des Untersuchungsmaterials

2.2.1. Auswahl der Kristalle

In Vorversuchen wurden den Proben, die verschiedenen Chemismus und unterschiedliche Genese aufwiesen, mehrere Kristalle entnommen. Dabei wurde anhand von Weissenberg-Aufnahmen nach Material gesucht, das möglichst unverzwilligt war. Infolge der Pseudosymmetrien bei Plagioklasen sind jedoch unverzwilligte Proben selten. Die Proben StaMü und 1447 zeigten Verzwilligungen nach dem Albit (Spiegelung an (010))- und Periklin (Drehung um 180° um [010])-Gesetz, die Proben N21 und N103 kleine Zwillingsanteile nach dem Albit-Gesetz. Von der Probe 18 stand nur ein Kristallindividuum zur Verfügung. Dieses war unverzwilligt, ebenso der für die Strukturverfeinerung verwendete Kristall N26 K2. Für die weiteren Experimente wurden auch nur Kristalle verwendet, die möglichst gut ausgebildete e- und f-Satelliten zeigten. Damit sollte gewährleistet werden, daß die Proben bei ihrer Entstehung hinreichend langsam abgekühlt wurden und somit gut definierte Überperioden entstehen konnten. Die so ausgewählten Kristalle sind in Tab. 1 beschrieben. Unter anderen Gesichtspunkten wurde bereits Material aus den verwendeten Proben untersucht. Literaturstellen hierzu sind ebenfalls in Tab. 1 mitaufgeführt.

Tab. 1: Überblick über die verwendeten Kristalle

Bezeichnung der Probe	verwendeter Kristall	Fundort	Gesteinstyp	Habitus	Abmessungen [mm]	Literatur
StaMü	KN3	nicht bekannt	nicht bekannt	Plättchen	0.43x0.33x0.13	-
N21	K4	Steinbruch,Anzola[+)] Valle d'Ossola/ Italien	Amphibolit mit[+)] gabbroider Zusammensetzung	Plättchen	0.38x0.28x0.08	/21/
N103	K2	Narødal,Sognefjord/ Norwegen	Anorthosit	Plättchen	0.35x0.15x0.05	/18,21/
1447	KN4	Steinbruch,Anzola[+)] Valle d'Ossola/ Italien	Amphibolit mit[+)] gabbroider Zusammensetzung	Plättchen	0.20x0.18x0.08	/21/
18	K12	Indien	Anorthosit	Plättchen	0.36x0.22x0.09	/21,34,41/
N26	K2	Riale Arsa,Valle[+)] d'Ossola/Italien	Amphibolit mit[+)] gabbroider Zusammensetzung	Bruchstück	0.33x0.25x0.15	-

[+)] Die Angaben der Fundorte und der Gesteinstypen stammen von Nissen (pers. Mitt.).

2.2.2. Chemismus der Proben

Da die Breiten der chemisch und strukturell unterschiedlichen Phasen der intermediären Plagioklase im Bereich einiger Gitterkonstanten liegen, erhält man mit den üblichen Methoden wie Mikrosonde oder Neutronenaktivierungsanalyse nur den gemittelten Chemismus der Proben oder die Zusammensetzung größerer Bereiche, jedoch nicht den individuellen Chemismus der Phasen, aus denen sich nach den Strukturvorschlägen der verschiedenen Autoren die Plagioklase zusammensetzen. Da jedoch ein Zusammenhang zwischen den Gitterkonstanten und dem Anorthit-Gehalt - insbesondere die Winkel γ und γ^* variieren stark - bekannt ist /3,50/, kann der Chemismus röntgenographisch bestimmt werden, falls Reflexe gefunden werden, die den verschiedenen Phasen zugeordnet werden können. Hierzu gehören Gittermetrikbestimmung aus aufgespaltenen a-Reflexen oder - bei genügender Schärfe - nur aus c-Reflexen, die für die anorthitreiche Phase charakteristisch sind.

Ein Überblick über die chemische Zusammensetzung der Proben wird in Tab. 2 gegeben.

Tab. 2: Chemismus der Proben

Bezeichnung der Probe	An-Gehalt gemittelter Chemismus	An-Gehalt Phase I	Phase II
StaMü	52 ± 4	nicht bestimmbar	
N21	58.5 ± 2	nicht bestimmbar	
N103	69.7 ± 2	65 ± 3	80 ± 3
1447	70 ± 4	65 ± 3	80 ± 3
18	75 ± 4	60 ± 3	90 ± 3
N26	78.6 ± 2	kein intermed. Plag.	

Im folgenden werden die Kristalle nicht mehr durch den Probennamen, sondern anhand des gemittelten Chemismus unterschieden, da dieser für die weiteren Untersuchungen eine aussagekräftigere Größe darstellt.

Der gemittelte Chemismus der Proben in Tab. 2 wurde mit verschiedenen Verfahren bestimmt. Während er bei den Proben An_{52}, An_{70}, An_{75} optisch festgelegt wurde, wurde er bei den Proben $An_{58.5}$, $An_{69.7}$, $An_{78.6}$ mit Neutronenaktivierungsanalyse ermittelt. Die Angaben der Gesamtchemismen stammen von Korekawa und Nissen (pers. Mitt.).

Über Gittermetrikbestimmungen an nicht aufgespaltenen a-Reflexen wurde der gemittelte Chemismus überprüft und die Werte im Rahmen der Fehlergrenzen bestätigt. Dabei sind bei den Proben $An_{58.5}$, $An_{69.7}$, $An_{78.6}$ aufgrund der genaueren Bestimmungsmöglichkeit des An-Gehalts (Neutronenaktivierung) kleinere Fehler zu erwarten.

Bei den zweiphasigen Proben ist der individuelle Chemismus der Phasen bereits von Jagodzinski und Korekawa /21/, die mit hochauflösenden Verfahren aufgespaltene a-Reflexe beobachtet hatten, abgeschätzt worden (Tab. 2: Proben $An_{69.7}$, An_{70}). Diese Aufspaltungen konnten, abgesehen von einer schwachen Andeutung bei der Probe $An_{69.7}$ hier nicht nachgewiesen werden. Da die Breiten beider Phasen innerhalb weniger Gitterkonstanten liegen und die Gittermetriken sich kaum unterscheiden, werden starke Kohärenzeffekte auftreten. Damit verbunden wird starke diffuse Streuung zwischen den a-Reflexen beider Phasen zu beobachten sein und die a-Reflexe werden in ihrem Verhalten in der Weise moduliert, daß jeder a-Reflex Beiträge der anderen Phase enthält ("modulierte diffuse a-Reflexe"). Damit stößt jedoch die Bestimmung des individuellen Chemismus schnell an ihre Grenzen. Aufgrund der kohärenten Verwachsung beider Phasen und der geometrischen Anpassung an den Grenzflächen

werden die a-Reflexe - falls überhaupt eine Aufspaltung beobachtet werden kann - immer einen zu hohen An-Gehalt für die anorthitarme- und einen zu niedrigen An-Gehalt für die anorthitreiche Phase vorspiegeln.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde auch versucht, nur mit c-Reflexen die Metriken zu bestimmen. Dies gelang wegen der starken Diffusität dieser Reflexgruppe nur bei der Probe An_{75} (siehe Tab. 4). Der Chemismus der Phase I dieser Probe ergab sich aus der Differenz der Phase II zum gemittelten Chemismus (Tab. 2: Probe An_{75}).

Abgesehen von der Probe $An_{69.7}$ sind keine Untersuchungen der Akzessorien durchgeführt worden. Hier wurden 0.6 - 0.9 Mol-% Orthoklas gefunden /51/.

2.2.3. Beugungssachverhalt der Proben

Zusätzlich zu den Beugungscharakteristika, die im Gebiet von An_{50} - An_{80} erwartet werden (siehe Abb. 1), konnten auf lange belichteten Filmaufnahmen noch weitere diffuse Effekte beobachtet werden, die in Zusammenhang mit Fehlordnung und Grenzflächenstreuung diskutiert werden müssen. Der röntgenographische Sachverhalt ist in Tab. 3 zusammengestellt.

Tab. 3: Beugungscharakteristika

Probe	Reflexe	Bemerkung
An_{52}	a,c,e,f	-
$An_{58.5}$	a,c,e,f	diffuse Streuung zwischen a- und f-Reflexen, zwischen e-Reflexen
$An_{69.7}$	a_1,a_2,b,c,d,e,f	diffuse Streuung zwischen a(a_1,a_2)- und f-Reflexen, zwischen b- und e-Reflexen
An_{70}	a,b,c,d,e,f	wie $An_{69.7}$, keine Aufspaltung der a-Reflexe beobachtet
An_{75}	a,b,c,d,e,f	wie An_{70}
$An_{78.6}$	a,b,c,d	-

Zusätzlich zu den in Tab. 3 aufgeführten Beugungscharakteristika treten bei allen untersuchten intermediären Plagioklasen noch folgende Effekte auf:

a) anisotrope, leicht gewellte diffuse Streuung parallel der reziproken Richtung (010); b- bzw. e-Reflexe sind mit c-Reflexen verbunden.

b) anisotrope, gewellte diffuse Streuung parallel der reziproken Richtung ($\bar{1}10$); c-Reflexe sind untereinander verbunden.

Von untergeordneter Bedeutung sind:

c) diffuse Streuung parallel der reziproken Richtung ($\bar{1}01$); a-Reflexe sind mit b- bzw. e-Reflexen verbunden.

d) diffuse Fächer an b- bzw. e-Reflexen.

Röntgenaufnahmen mit den oben aufgeführten Effekten sind im Anhang A zu finden.

2.2.4. Gitterkonstanten

Die Gitterkonstanten der Kristalle aus den Proben An_{52}, $An_{58.5}$, $An_{69.7}$, An_{70}, $An_{78.6}$ wurden anhand von je 25 a-Reflexen auf dem Einkristalldiffraktometer CAD 4 der Firma Enraf-Nonius bestimmt. Bei diesem Diffraktometer kann jeder Reflex mit positivem und negativem Beugungswinkel bestimmt werden. Damit entfallen vorhandene Θ-Nullpunktsfehler. Die Gitterkonstanten der Probe An_{75} wurden auf einem Einkristalldiffraktometer der Firma Siemens ermittelt. Dabei wurde die Gittermetrik sowohl mit a- als auch mit c-Reflexen festgelegt. Im Gegensatz zum Diffraktometer CAD 4 wird hier keine Standardabweichung angegeben.

Tab. 4: Gitterkonstanten
(in Klammern: Standardabweichung)

	An_{52}	$An_{58.5}$	$An_{69.7}$	An_{70}
a[Å]	8.174(1)	8.170(2)	8.176(1)	8.174(2)
b[Å]	12.861(2)	12.854(2)	12.864(2)	12.855(3)
c[Å]	14.222(2)	14.190(3)	14.196(2)	14.198(3)
α[°]	93.55 (1)	93.55 (1)	93.43 (1)	93.47 (2)
β[°]	116.26 (1)	116.13 (2)	116.14 (1)	116.15 (2)
γ[°]	89.80 (1)	90.10 (2)	90.47 (1)	90.50 (2)
V[Å^3]	1337.7 (7)	1334.6(1.1)	1337.0 (7)	1335.7(1.2)

	An_{75} (a-Refl.)	An_{75} (c-Refl.)	$An_{78.6}$
a[Å]	8.188	8.187	8.178(2)
b[Å]	12.862	12.868	12.873(2)
c[Å]	14.198	14.177	14.198(2)
α[°]	93.39	93.31	93.38 (1)
β[°]	116.12	115.88	116.11 (1)
γ[°]	90.62	90.98	90.70 (1)
V[Å^3]	1339.1	1340.0	1338.6 (9)

2.2.5. Satellitenvektoren und Überstrukturperioden

Wie bereits in Abschnitt 1.3.3. dargelegt, ändern sich in charakteristischer Weise die Koordinaten δh, δk, δl der Satellitenreflexe und der reziproke Betrag des Satellitenvektors, die Überstrukturperiode T als Funktion des An-Gehalts. Die in Tab. 5 ge-

gebenen Satellitenkoordinaten sind das arithmetische Mittel aus mehreren Satellitenpaaren. Für die Bestimmung dieser Koordinaten wurden mit a-Reflexen erstellte Gittermetriken verwendet. Die Listen der individuellen Koordinaten der Satelliten sind im Anhang D aufgeführt.

Tab. 5: Gemittelte Satellitenkoordinaten und Überstrukturperioden (in Klammern: Standardabweichung)

Probe	δh	δk	δl	T[Å]
An_{52}	0.062(1)	0.049(1)	-0.219(2)	32(1)
$An_{58.5}$	0.032(0)	0.072(1)	-0.153(3)	42(1)
$An_{69.7}$	0.017(2)	0.075(3)	-0.107(2)	54(2)
An_{70}	0.013(1)	0.073(2)	-0.099(2)	56(2)
An_{75}	0.005(1)	0.071(5)	-0.067(7)	69(5)

2.3. Strukturbestimmung der Proben An_{52} und $An_{78.6}$

2.3.1. Gründe einer neuerlichen Strukturverfeinerung

Es war nicht zu erwarten, daß die Strukturverfeinerungen der beiden Endglieder grundlegend neue Erkenntnisse bezüglich der gemittelten Struktur liefern würden. Diese Strukturen sind anhand der a-Reflexe auf der Ca-armen Seite von Klein /32/ und mit a- und b-Reflexen auf der Ca-reichen Seite von Fleet et al. /13/ bestimmt worden, letztere jedoch nur mit Filmmethoden und mit isotropen Temperaturfaktoren. Die Gründe einer nochmaligen Strukturverfeinerung lagen darin, daß für die in Abschnitt 2.5.5. durchgeführte Skalierung der integralen Intensitäten von c-Reflexen genaue Strukturfaktoren der a-Reflexe bekannt sein mußten. Dabei war

außerdem zu hoffen, daß mit der heute möglichen Meßgenauigkeit eine bessere Übereinstimmung, insbesondere bezüglich des Ca-reichen Kristalls, zwischen beobachteten und berechneten Strukturfaktoren erzielt würde. Schließlich sollte auch eine Verfeinerung mit anisotropen Temperaturfaktoren durchgeführt werden.

Die Nomenklatur, die bei den Atomparametern verwendet wird, entspricht der von Megaw /45/. Ausgehend von der Struktur des Sanidins werden für die Pseudosymmetrien folgende Symbole verwendet. Es bedeuten: m = Spiegelebene (mirror plane), z = c-Kantenzentrierung, i = Innenzentrierung, c = Inversionszentrum (center of symmetry). Selbstverständlich sind auch Kombinationen erlaubt. So bedeutet z. B. iz = C-Flächenzentrierung.

2.3.2. Messungen

Die Messungen wurden auf einem automatischen Einkristalldiffraktometer CAD 4 mit Graphit-Monochromator und Molybdän-Röhre durchgeführt. Aus einer Vollkugel mit einer 2ϑ -Begrenzung von 50 Grad wurden für die Probe An_{52} 2526 a-, für die Probe $An_{78.6}$ 4818 a- und b-Reflexintensitäten ermittelt. Nach jeweils 100 vermessenen Reflexen wurde die Orientierung der Kristalle und nach jeweils 30 Minuten bei der Probe An_{52} und 180 Minuten bei der Probe $An_{78.6}$ die Intensität der Röntgenröhre anhand von Kontrollreflexen überprüft.

Auf sehr lange und stark überbelichteten Weissenberg-Aufnahmen wurden bei dem Ca-reichen Plagioklas auch diffuse c-Reflexe beobachtet. Die Hoffnung, deren Intensitäten mit einer erheblich vergrößerten Scanweite und langer Meßzeit auf dem Diffraktometer zu ermitteln, erfüllte sich nicht, da diese im reziproken Raum zu ausgedehnt waren und kein vernünftiges Intensitäts- zu Untergrundverhältnis erzielt werden konnte.

2.3.3. Datenreduktion

Nach den üblichen Kriterien wurden die Datensätze beider Kristalle bezüglich Untergrund, unterschiedlicher Meßzeit, Polarisations- und Lorentzfaktor korrigiert. Im weiteren Verlauf wurde über die symmetrisch äquivalenten Reflexe (wegen der triklinen Kristallsymmetrie nur Friedel-Paare) gemittelt. Zusätzlich werden bei der Strukturanalyse alle Strukturfaktoren mit F = 0 unterdrückt. Damit stand für die anschließende Verfeinerung folgende Zahl von Reflexen zur Verfügung:

An_{52}	:	1178	a-Reflexe
$An_{78.6}$	:	1166	a-Reflexe
		1134	b-Reflexe

2.3.4. Auswertung der Datensätze

Für die Auswertung wurde das Strukturpaket SHELX /60/ verwendet. Dies war an einem CDC-Rechner CYBER verfügbar.

Als Maß für die Übereinstimmung zwischen dem Strukturmodell und den gemessenen Daten wird im weiteren immer der gewichtete R-Wert R_G angegeben. Dieser ist definiert als

$$R_G = \left(\frac{\sum w \, (F_O - F_C)^2}{\sum w \, F_O^2} \right)^{1/2}$$

mit F_O = beobachteter Strukturfaktor
F_C = berechneter Strukturfaktor
w = Gewicht.

Das Gewicht w ergibt sich aus $w = \frac{1}{\sigma^2}$, wobei σ der statistische Fehler der Messung ist.

2.3.5. Strukturanalyse des Ca-armen Endglieds $Ca_{0.52}Na_{0.48}Al_{1.52}Si_{2.48}O_8$ (An$_{52}$)

2.3.5.1. Verfeinerung

Basierend auf einer Anorthit-Zelle mit der Symmetrie $P\bar{1}$ und der c-Gitterkonstanten von etwa 14.2 Å entspricht die Verfeinerung nur mit a-Reflexen ($h + k = 2n$, $l = 2n$) einer höher symmetrischen Zelle mit der Symmetrie $C\bar{1}$ und einer halbierten c-Gitterkonstanten. Infolgedessen können nur 52/4 = 13 Atome unabhängig verfeinert werden. In einem späteren Stadium erhöht sich diese Zahl um 1, da die Ca/Na-Lage in zwei Positionen gesplittet werden muß.

Als Startpunkt diente der Datensatz von Klein /32/. Beginnend mit einem R_G-Wert = 0.321 konvergierte die Verfeinerung mit isotropen Temperaturfaktoren nach 3 Zyklen bei R_G = 0.160. Dabei waren die Kationenplätze gemäß der chemischen Formel mit "gemittelten" Ionen besetzt, d. h. die Besetzungszahlen für Ca(Na) betrugen 0.52(0.48), für Al(Si) lauteten sie 0.38(0.62). Die anschließende Verfeinerung mit anisotropen Temperaturfaktoren U_{ij} erbrachte nach 6 Zyklen den R_G-Wert = 0.066. Dabei zeigte das mittlere Amplitudenquadrat des Matrix-Elements U_{22} der Ca/Na-Lage einen ungewöhnlich hohen Betrag von 0.2066 Å^2, so daß eine Aufspaltung dieser gemittelten Position notwendig erschien. Nach dieser Splittung sank der R_G-Wert nach weiteren 3 Zyklen auf R_G = 0.034.

Damit war die Verfeinerung der gemittelten Struktur abgeschlossen. Die Atomparameter sind im Anhang B 1, die T-O-Bindungslängen im Anhang B 2 und die beobachteten und berechneten Strukturfaktoren im Anhang B 3 aufgeführt.

2.3.5.2. Ergebnisse und ihre Diskussion

Ein Vergleich mit den Daten von Klein zeigt keine signifikanten Unterschiede. Die Aufspaltung der Ca- und Na-Atomlage war von der Größenordnung $\frac{\Delta x}{a}$ = 0.001 (0.002), $\frac{\Delta y}{b}$ = 0.055 (0.054), $\frac{\Delta z}{c}$ = 0.034 (0.035). In Klammern sind die Werte von Klein angegeben. Abgesehen von der beträchtlichen Senkung des R_G-Wertes nach der Splittung der Ca/Na-Lage ist diese bei intermediären Plagioklasen in Anbetracht der Dichte- und Verschiebungswellen in der Überstruktur auch physikalisch gerechtfertigt.

Der von Klein angegebene R-Wert nach der Splittung beträgt 0.077. Dabei ist jedoch keine Aussage getroffen, ob dies der gewichtete oder ungewichtete R-Wert ist.

Bemerkenswert sind die großen Temperaturellipsoide von Kalzium, Natrium und Sauerstoff gegenüber den kleineren der Aluminium- und Silizium-Atome. Eine Analyse der Bindungslängen deutet darauf hin, daß Aluminium überwiegend den Platz $T_1(O)$ einnimmt, da die gemittelten Abstände $T_1(O) - O$ um etwa 0.04 Å länger sind als die Abstände $T_1(m) - O$, $T_2(O) - O$ und $T_2(m) - O$.

2.3.6. Strukturanalyse des Ca-reichen Endglieds

$Ca_{0.79}Na_{0.21}Al_{1.79}Si_{2.21}O_8$ $(An_{78.6})$

2.3.6.1. Verfeinerung

Im Gegensatz zum Ca-armen Endglied wurden außer den scharfen a-Reflexen (h + k = 2n, l = 2n) auch scharfe b-Reflexe (h + k = 2n + 1, l = 2n + 1) beobachtet. Bezieht man sich in Analogie zum Abschnitt 2.3.5.1. wieder auf die Anorthit-Zelle, entsprechen diese beiden Reflexgruppen einer Eigensymmetrie $I\bar{1}$ mit der Gitterkonstante $c \sim 14.2$ Å. Damit müssen 52/2 = 26 Atome unabhängig verfeinert werden, d. h. die Anordnung der Atome in

zwei Subzellen kann bestimmt werden.

Die Verfeinerung verlief in zwei Schritten. Im Anfangsstadium wurden nur a-Reflexe herangezogen, während zu einem späteren Zeitpunkt beide Reflexgruppen verwendet wurden. Als Ausgangspunkt dienten die gemittelten Atomparameter von Fleet et al. /13/. Dabei waren die Kationenplätze wieder mit "bastardisierten" Ionen belegt. Für die Ca(Na)-Ionen betrugen die Besetzungszahlen 0.79 (0.21), für Al(Si) lauteten sie 0.45 (0.55). Die isotrope Verfeinerung nur mit a-Reflexen konvergierte, beginnend bei einem R_G-Wert R_G = 0.517 nach 4 Zyklen bei einem Wert R_G = 0.133. Anschließend wurde anisotrop verfeinert, wobei nach 5 Zyklen der Wert R_G = 0.067 erreicht wurde. In diesem Stadium wurde jetzt der Parametersatz zweier um den ungefähren Verschiebungsvektor $\frac{1}{2}$ [001] translatierter Subzellen verwendet und mit a- und b-Reflexen anisotrop verfeinert. Nach 9 Zyklen war ein endgültiger R_G-Wert R_G = 0.058 erreicht. Zum Vergleich sei der (un)gewichtete R-Wert von Fleet et al. mit R = 0.118 angegeben.

Die Atomparameter sind im Anhang C 1, die T-O-Bindungslängen im Anhang C 2 und die Tabelle der Strukturfaktoren im Anhang C 3 aufgeführt.

2.3.6.2. Ergebnisse und ihre Diskussion

Da die c- und d-Reflexe nicht berücksichtigt werden konnten, wurde nur eine innenzentrierte Struktur abgeleitet. Diese ist jedoch in guter Näherung erfüllt, da die c- und d-Reflexe aufgrund ihrer schwachen Intensität wenig Beiträge zur Strukturanalyse liefern dürften.

Eine Analyse der Temperaturfaktoren zeigt stark anisotrope Ellipsoide der beiden Großkationlagen. Dieses Ergebnis ist in Übereinstimmung mit von Fleet et al. erstellten Fourier- und

Differenzfouriersynthesen, die stark elliptische Maxima insbesondere für die Ca/Na-Lagen aufwiesen. Dieser Umstand veranlaßte Fleet et al. dazu, diese Plätze zu splitten und mit je zwei gemittelten "Halb"-Atomen zu besetzen. Anschließend wurde jeweils eine dieser Lagen um den Vektor $\frac{1}{2}$ [111] verschoben. Aufgrund dieser Atomanordnung postulierten Fleet et al. kleine kohärent streuende Antiphasendomänen mit dem Verschiebungsvektor $\frac{1}{2}$ [111]. Da damit jedoch die innenzentrierte Näherung verlassen wird und ohne die Intensitäten der c- und d-Reflexe keine weiteren Aussagen möglich sind, wurde dieses Verfahren, das natürlich die Ausdehnung der elliptischen Maxima verkleinert, nicht übernommen.

Überprüft man zusätzlich zu dieser Arbeit Strukturverfeinerungen von Plagioklasen im Bereich von An_{80} - An_{100} (Berking An_{90} /4/, Smyth An_{92-96} /64/, Czank An_{98} /10/, Kalus An_{100} /26/, Wainwright und Starkey An_{100} /74/), werden, abgesehen von der Arbeit von Smyth, immer größere Temperaturfaktoren für den Platz M(000) und kleinere für den Platz M(z00) beobachtet. Dies zeigt, daß die beiden Großkationlagen nicht nur wegen des nur ungefähr erfüllten Translationsvektors $\frac{1}{2}$ [001], sondern auch wegen des unterschiedlichen Verhaltens der Temperaturfaktoren ungleichwertig sind. Bei Smyth wird unter anderem die Lage M(000) gesplittet. Er läßt sogar Leerstellen zu. Die dadurch erzielte Senkung des Temperaturfaktors geht jedoch einher mit einer Vergrößerung des Faktors des Platzes M(z00).

Die T-O-Abstände zeigen zwei Häufungspunkte bei etwa 1.62 Å und 1.72 Å, so daß eine Unterteilung in Si-reiche und Al-reiche Tetraeder getroffen werden muß. Dabei werden in Analogie zum reinen Anorthit die Plätze T_1(00), T_1(mz), T_2(0z), T_2(m0) überwiegend durch Silizium besetzt, während die Lagen T_1(0z), T_1(m0), T_2(00), T_2(mz) durch Aluminium belegt sind. Ein Vergleich der Bindungslängen dieser Arbeit, von Fleet et al. /13/ und von Kalus /26/ wird im Anhang F 1 durchgeführt.

2.4. Experimentelle Methoden zur Untersuchung der diffusen Reflexe

2.4.1. Röntgenmonochromator nach Johansson-Guinier

Für alle Filmaufnahmen wurden Cu-Feinfokusröhren mit einer Leistung von 800 Watt (40 kV, 20 mA) in Verbindung mit einem gebogenen Germanium-Monochromator verwendet. Der Monochromatorkristall war nach dem Johansson-Prinzip hergestellt. Durch Beugung an der Netzebenenschar (111) wurde aus dem polychromatischen Spektrum der Röntgenröhre dem Einfallswinkel entsprechend ein schmaler Wellenlängenbereich $\lambda \pm \Delta\lambda$ reflektiert. Die sehr gute Auflösung des Monochromatorkristalls ermöglichte sogar eine saubere Trennung von $CuK\alpha_1$ und $CuK\alpha_2$. Da der Strukturfaktor F_{222} Null ist, traten keine $\lambda/2$-Reflexe auf. Um eine hohe Intensitätsausbeute zu erzielen, wurde der monochromatische Strahl auf den Kristall fokussiert. Außerdem wurden große Primärstrahldivergenzen zugelassen. Sie betrugen in der Fokussierungsebene (azimutaler Öffnungswinkel) $\epsilon_z \sim 1^\circ$ und senkrecht zur Fokussierungsebene (axialer Öffnungswinkel) $\epsilon_x \sim 1.3^\circ$. Die Fokussierungsebene ist durch die drei Punkte Röhrenfokus, Monochromatorkristall, Probe definiert. Die Achse des Monochromatorkristalls stand senkrecht zur Drehachse der Probe.

2.4.2. Die Noromosic-Technik

Der Begriff Noromosic ist eine Abkürzung des Ausdrucks non-rotating-monochromatic-single-crystal. Dieses Verfahren wurde das erste Mal von Jagodzinski und Korekawa /19/ beschrieben. Es entspricht der Beugungsanordnung für eine monochromatische Schwenkaufnahme, jedoch wird während der Dauer der Aufnahme der Kristall nicht rotiert, es werden auch keine Schichtlinienblenden verwendet. Die Bereiche des reziproken Gitters, die für die vorgegebene monochromatische Wellenlänge und den fest eingestellten Azimut-Winkel

des Kristalls auf der Ewald-Kugel liegen, werden dabei in eindeutiger Weise auf den zylindrischen Film abgebildet. Die streng monochromatische Strahlung erlaubt hohe Überbelichtung, die es ermöglicht, auch schwache Reflexe und diffuse Streuung noch quantitativ erfassen zu können. Für die Noromosic-Aufnahmen wurden 22 Stunden Belichtungsdauer benötigt. Die dabei auftretende starke diffuse Streuung bei kleinen Beugungswinkeln rührt vorwiegend von Luftstreuung in der Kamera her. Einige Noromosic-Aufnahmen sind im Anhang A 1 zu finden.

2.4.3. Die simulierte Weissenberg-Technik

Aufgrund der Technik des Noromosic-Verfahrens entspricht eine Aufnahme genau einem Schnitt durch das reziproke Gitter. Um eine volle Information über die räumliche Ausdehnung von diffusen Reflexen zu erhalten, müssen jedoch mehrere Schnitte in definierten Abständen durch den reziproken Raum gelegt, d. h. es müssen Noromosic-Aufnahmen bei verschiedenen Azimut-Winkeln erstellt werden. Die Änderung des Azimut-Winkels entspricht dabei einer Drehung des Kristalls um die Goniometerkopflängsachse. Die simulierte Weissenberg-Aufnahme wird nun dadurch erhalten, daß man aus den bei verschiedenen Azimut-Winkeln erstellten Noromosic-Aufnahmen jeweils die gleiche interessierende Schicht herausschneidet und diese in äquidistanten Abständen aneinanderklebt. Simulierte Weissenberg-Aufnahmen sind im Anhang A 2 aufgeführt.

Mit Hilfe dieser beiden Verfahren - Noromosic- und simulierte Weissenberg-Technik - wurden nun anhand der Proben An_{52}, $An_{58.5}$, $An_{69.7}$, An_{70} und An_{75} jeweils die gleichen interessierenden Bereiche des reziproken Raumes aufgenommen und ausgewertet.

2.5. Die diffusen c- und d-Reflexe

2.5.1. Auswahl geeigneter Reflexe

Nach den Modellvorstellungen der Autoren im Abschnitt 1.3.3.1. bis 1.3.3.8. soll die Ca-reiche Phase der intermediären Plagioklase mit fallendem An-Gehalt in ihrer Zellenzahl abnehmen. Aus diesem Grunde ist zu erwarten, daß die c- und d-Reflexe immer diffuser werden und damit - trotz des Einsatzes von Noromosic- und simulierter Weissenberg-Technik - ihr Nachweis immer schwerer zu führen ist. So wurde die Forderung gestellt, ein Gebiet im reziproken Raum zu finden, das hohe Strukturfaktoren von c- und d-Reflexen und damit hohe Intensitäten vermuten läßt. Zusätzlich sollten für die Untersuchung des Intensitätsverlaufes große Änderungen der Azimut-Winkel benötigt werden, um zu den den c- oder d-Reflexen benachbarten Reflexen zu gelangen, d. h. es sollten trotz großer Eingangsdivergenzen mehrere verschiedene Schnitte durch die diffusen Reflexe möglich sein. Nach Überprüfung der Strukturfaktoren anhand der Arbeiten von Kalus (An_{100}) /26/ und Czank (An_{98}) /10/ wurde ein Gebiet im reziproken Raum festgelegt, dessen starke c- und d-Reflexe im weiteren untersucht werden. Diese sind in Tab. 6 aufgeführt.

Für die röntgenographischen Messungen wurden die Kristalle parallel der reellen Achse [100] oder [$\bar{1}$00] aufgeklebt. Damit konnten bei Änderung des Azimutwinkels Schnitte durch die reziproke Richtung (010) gelegt werden. In dieser Richtung ist die Diffusität der c- und d-Reflexe besonders ausgeprägt. Somit kann auf den simulierten Weissenberg-Aufnahmen die Folge b(e)-Reflex - diffuser c-Reflex - b(e)-Reflex bzw. a(f)-Reflex - diffuser d-Reflex - a(f)-Reflex beobachtet werden.

Tab. 6: Liste der untersuchten c- und d-Reflexe

c-Reflexe			d-Reflexe
$\bar{4}\bar{6}\bar{7}$ 2)	$\bar{3}5\bar{3}$ 2)	$26\bar{7}$ 1)2)	$\bar{2}\bar{7}\bar{2}$ 1)
$\bar{4}4\bar{3}$ 2)	$\bar{2}6\bar{5}$ 2)	$35\bar{11}$ 1)2)	$05\bar{4}$ 1)
$\bar{3}\bar{7}\bar{9}$ 2)	$\bar{1}5\bar{3}$ 1)2)	$4\bar{6}\bar{13}$ 2)	$43\bar{14}$ 1)
$\bar{3}5\bar{9}$ 1)	$02\bar{15}$ 2)	$42\bar{7}$ 2)	$45\bar{10}$ 1)
$\bar{3}5\bar{7}$ 1)	$06\bar{5}$ 1)2)	$44\bar{11}$ 1)2)	

1) Diese Reflexe wurden zur Bestimmung von Halbwertsbreiten verwendet.

2) Diese Reflexe wurden zur Bestimmung der integralen Intensität verwendet.

Für alle zu untersuchenden Kristalle wurden je 13 Noromosic-Aufnahmen im Abstand von 2° angefertigt. Dabei wurde darauf geachtet, daß die aufgenommenen Schnitte des reziproken Raumes für die verschiedenen Kristalle exakt übereinstimmten.

Im Anhang A 1 ist ein Satz von Noromosic-Aufnahmen aufgeführt. Einige c- und bei höheren Chemismen auch d-Reflexe sind markiert. Aus den Aufnahmen, bei denen jeweils das gleiche Gebiet des reziproken Raumes abgebildet ist, wird qualitativ deutlich, daß die Beugungscharakteristika im gesamten untersuchten Bereich praktisch unverändert bleiben, jedoch die Diffusitäten stark variieren. Zusätzlich erkennt man in Kombination mit den simulierten Weissenberg-Aufnahmen, daß die Streuung der diffusen c- und d-Reflexe in guter Näherung in Ebenen (hkl_o) mit l_o = const. liegt.

2.5.2. Messung der Halbwertsbreiten

Aus der Lage der c- und d-Reflexe auf den Noromosic-Aufnahmen konnten Halbwertsbreiten sowohl parallel als auch senkrecht zu den reziproken Ebenen (hkl_0) mit l_0 = const. ermittelt werden. Die Photometerkurven der einzelnen Reflexe wurden mit einem Densitometer der Firma Joyce-Loebl aufgenommen.

Ein charakteristischer Vertreter der c- und d-Reflexe ist der Reflex ($\bar{3}5\bar{9}$). Dessen Photometerkurven parallel und senkrecht der reziproken Richtung ($\bar{1}10$) sind mit steigendem An-Gehalt in Abb. 6 bis 10 dargestellt. Die reziproke Richtung ($\bar{1}10$) liegt in der reziproken Ebene (hk$\bar{9}$), d. h. es wurde parallel und senkrecht zur reziproken Ebene (hkl_0) mit $l_0 = \bar{9}$ gemessen. Man beachte auf der Ordinate der Abbildungen die unterschiedlichen Einheiten der optischen Dichte. Die verschiedene Höhe des Untergrundes des Reflexes bei niedrigen An-Gehalten resultiert aus der Luftstreuung der Kamera, die sich bei kleinen Beugungswinkeln bemerkbar macht, und der Wahl des Schwärzungskeils, der einen sehr geringen Dichtegradienten aufweist.

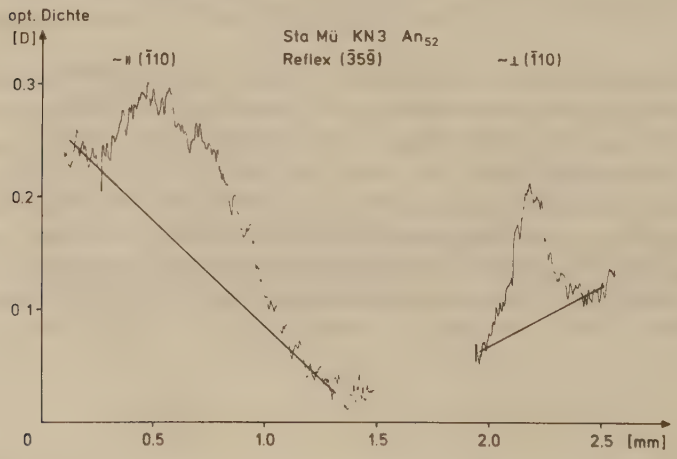

Abb. 6: Photometerkurven des Reflexes ($\bar{3}5\bar{9}$) der Probe An_{52}

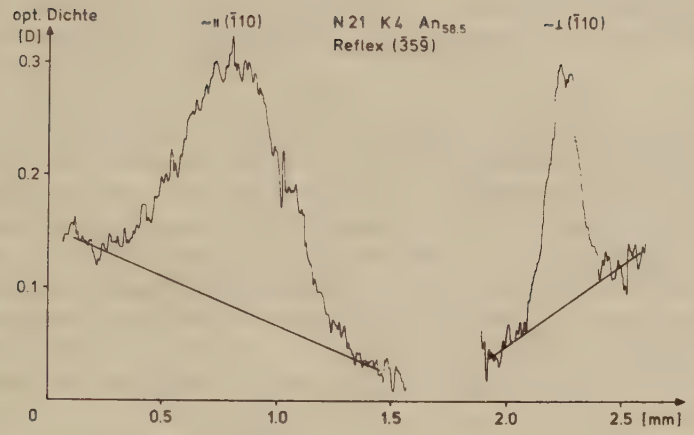

Abb. 7: Photometerkurven des Reflexes ($\bar{3}5\bar{9}$) der Probe $An_{58.5}$

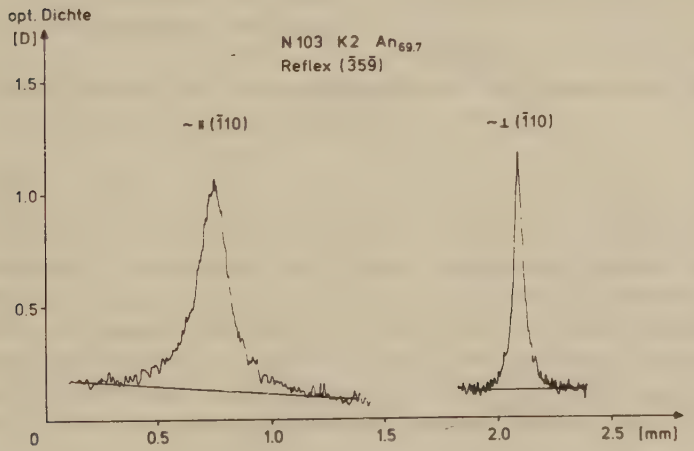

Abb. 8: Photometerkurven des Reflexes ($\bar{3}5\bar{9}$) der Probe $An_{69.7}$

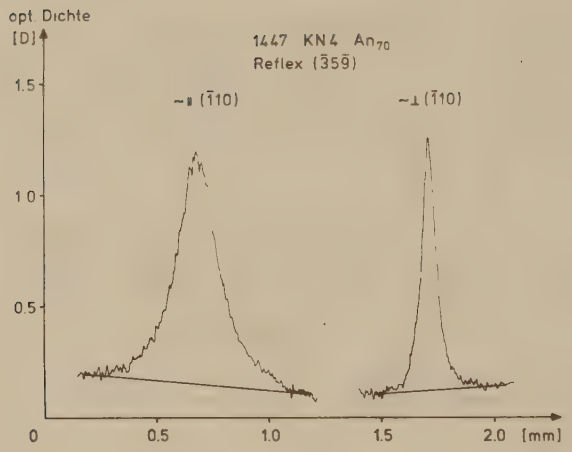

Abb. 9: Photometerkurven des Reflexes ($\bar{3}5\bar{9}$) der Probe An_{70}

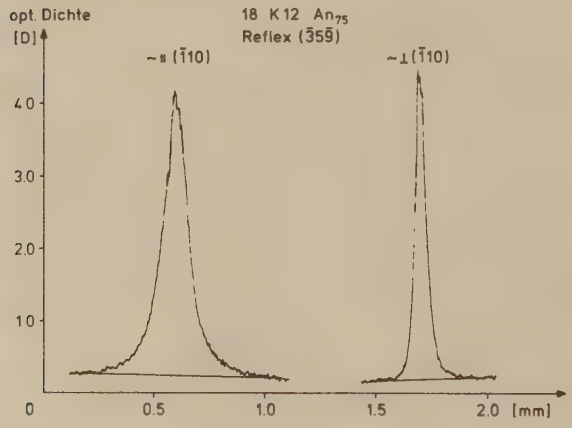

Abb. 10: Photometerkurven des Reflexes ($\bar{3}5\bar{9}$) der Probe An_{75}

Aus den Halbwertsbreiten können nun formal Teilchengrößen ermittelt werden. Bekanntlich sind Teilchengrößen proportional zum reziproken Betrag der Halbwertsbreiten in den betreffenden photometrierten Richtungen.

Diese Proportionalitätskonstante, die den Wert $K \sim 1$ besitzt, hängt von mehreren Faktoren ab. Je nach Näherung und Definitionen in der Gleichung für die Teilchengrößenbestimmung werden leicht verschiedene K-Werte erhalten /42,75/. Auch geht die Form der Kristallite in diese Konstante ein. Da jedoch diese in den meisten Fällen unbekannt ist und die Teilchen untereinander verschiedene Gestalt besitzen können, wird obige Konstante üblicherweise $K = 1$ gesetzt /25/. Diese Annahme wird auch hier getroffen.

Für eine genauere Bestimmung von Teilchen- bzw. Domänengrößen aus Filmaufnahmen können noch einige Korrekturen angebracht werden:

a) Die Halbwertsbreiten werden aus Intensitäts- und nicht aus Schwärzungskurven ermittelt.

b) Die Geometrie des Aufnahmeverfahrens muß für die Bestimmung der Halbwertsbreiten berücksichtigt werden.

Zu a):

Mittels eines Absorptions-Stufenkeils wurde auf jeden Film eine Eichtreppe aufgebracht. Damit wurden automatisch Fehler korrigiert, die durch Entwickler- oder Fixiereinflüsse hervorgerufen waren. Für die Eichtreppen wurde die gleiche Beugungsanordnung verwendet wie für die Aufnahme. Anhand der für jeden Film eigens angefertigten Schwärzungskurve konnten die Intensitätskurven und daraus die reduzierten Halbwertsbreiten gewonnen werden.

Zu b):

Die Halbwertsbreiten werden senkrecht zu den Schichtlinien bei steigenden Entfernungen vom Äquator immer größer, da die reflektierten Strahlen größere Wege in der Kamera zurücklegen. Dieser geometrische Effekt wird eliminiert, wenn die Filmkoordinaten x_i, y_i der Halbwertsbreiten transformiert werden in Koordinaten des reziproken Raumes, d. h. in reziproke Vektoren $\vec{H}_i$.

Den beiden Eckpunkten der Halbwertsbreiten werden somit reziproke Vektoren $\vec{H}_{i1}$ und $\vec{H}_{i2}$ zugeordnet. Aus der Lage des Differenzvektors $\Delta\vec{H}_i = \vec{H}_{i1} - \vec{H}_{i2}$ und dessen reziprokem Betrag $\frac{1}{|\vec{H}_i|}$ lassen sich reziproke Richtung, in der photometriert wurde und Größe der Domäne in der betreffenden Richtung bestimmen.

2.5.3. Abhängigkeit der Halbwertsbreiten und der Domänenbreiten vom Gesamtchemismus

Die nach obigem Verfahren ermittelten Domänenbreiten zeigen eine deutliche Änderung mit Variation des An-Gehalts. Dies wird in Abb. 11 anhand des Reflexes $(\bar{3}5\bar{9})$ dargestellt.

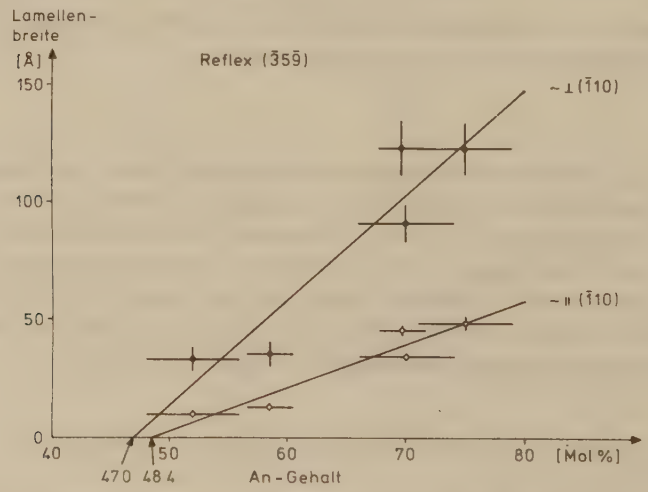

Abb. 11: Abhängigkeit der Lamellenbreiten vom Gesamtchemismus.

Die horizontalen Fehlerbalken in Abb. 11 entsprechen der Unsicherheit im Chemismus, die vertikalen dem Fehler in der Bestimmung der Lamellenbreite.

Man erkennt aus obiger Abbildung, daß die einzelnen Punkte in relativ starkem Maße um die Ausgleichsgeraden streuen. Die Ursache dürfte in der Tatsache zu finden sein, daß Kristalle unterschiedlicher Genese verwendet wurden. Kristalle mit langsamer Abkühlungsgeschwindigkeit können größere Teilchen bzw. größere Ca-reiche Lamellen ausbilden und damit schärfere c- und d-Reflexe erzeugen als Kristalle, die schneller abgekühlt werden. Dies wird deutlich am Beispiel der Proben $An_{69.7}$ und An_{70}, deren Gesamtchemismus nur um etwa 0.3 Mol-Prozent Anorthit variiert, deren Domänengrößen jedoch außerhalb der Fehlergrenzen signifikante Unterschiede aufweisen.

Die Extrapolation der Ausgleichsgeraden in Abb. 11 und in Tab. 8 (siehe unten) darf nicht zu der Annahme führen, daß bei An-Gehalten von etwa An_{50} Teilchen erwartet werden, deren Durchmesser kleiner wären als die Länge von mindestens einer Gitterkonstanten in der betreffenden Richtung. Auch die hier durchgeführten Messungen konnten nie Teilchengrößen kleiner als eine Gitterlänge nachweisen. Sie soll jedoch darlegen, bei welchem An-Gehalt keine Ca-reichen Lamellen mehr erwartet werden.

In Tab. 7 sind die Lamellendicken, die aus den korrigierten Halbwertsbreiten der c- und d-Reflexe gewonnen wurden, parallel und senkrecht zu den reziproken Ebenen (hkl_0) mit l_0 = const. aufgeführt.

Tab. 7: Domänenbreiten [Å] aus c-, d-Reflexen

hkl	An_{52} ∥(hkl_o)	An_{52} ⊥(hkl_o)	$An_{58.5}$ ∥(hkl_o)	$An_{58.5}$ ⊥(hkl_o)	$An_{69.7}$ ∥(hkl_o)	$An_{69.7}$ ⊥(hkl_o)	An_{70} ∥(hkl_o)	An_{70} ⊥(hkl_o)	An_{75} ∥(hkl_o)	An_{75} ⊥(hkl_o)
$\bar{3}5\bar{9}$	10	32[2]	13	34[2]	45	122[2]	34	92[2]	49	121[2]
$\bar{3}5\bar{7}$	15	31	16	43	48	119	36	98	48	107
$\bar{1}5\bar{3}$	11[1]	20	13[1]	34	43[1]	101	30[1]	74	44[1]	83
$06\bar{5}$	12[1]	22[2]	13[1]	34[2]	31[1]	80[2]	24[1]	73[2]	40[1]	73[2]
$26\bar{7}$			13	25[2]	36	141[2]	24	107[2]	44	141[2]
$35\bar{1}\bar{1}$	14	33[2]	14	37[2]	28	107[2]	24	81[2]	37	121[2]
$44\bar{1}\bar{1}$	13	24	20	30	27	197	24	91	42	152
$\bar{2}\bar{7}\bar{2}$									54[1]	159
$05\bar{4}$					56[1]	99	29[1]	99	59[1]	99
$43\bar{1}\bar{4}$									44	171
$45\bar{1}0$									51	172[2]

[1] Diese Richtungen laufen etwa parallel der reellen [100]-Achse
[2] Diese Richtungen laufen etwa parallel der reellen [001]-Achse

Aus Abb. 11 und Tab. 7 wird ersichtlich, daß die Domänenbreiten mit fallendem Gesamtchemismus abnehmen. Ein besonderes Interesse gilt der Frage, bei welchem An-Gehalt keine aus c- und d-Reflexen ermittelten Domänen mehr erwartet werden, d. h. ab welchem An-Gehalt keine Anorthit-Lamellen mehr auftreten. Trägt man, wie aus Abb. 11 ersichtlich, die Domänengrößen in Abhängigkeit des An-Gehalts auf, ergeben sich aus Extrapolation der Ausgleichsgeraden folgende in Tab. 8 dargestellte Schnittpunkte mit der Abszisse (An-Gehalt).

Tab. 8: Ermittlung der Stabilitätsgrenze der Ca-reichen Lamelle

hkl	Grenze An [Mol-%]	
	$\parallel(hkl_o)$	$\perp(hkl_o)$
$\bar{3}5\bar{9}$	48.4	47.0
$\bar{3}5\bar{7}$	44.9	45.0
$\bar{1}5\bar{3}$	47.0	46.1
$06\bar{5}$	44.6	43.8
$26\bar{7}$	51.8	54.3
$35\bar{11}$	40.7	46.1
$44\bar{11}$	40.2	50.1
$05\bar{4}$	55.4	nicht bestimmbar
	Mittelwert:	47.0 ± 1.1

Aufgrund der schwachen Intensitäten können selbst bei hohen Überbelichtungen Halbwertsbreitenmessungen an d-Reflexen bei niederen An-Gehalten nicht durchgeführt werden, so daß, abgesehen von dem äußerst starken Reflex ($05\bar{4}$), zu wenig Meßpunkte für Ausgleichsgeraden zur Verfügung stehen.

Damit ist die Grenze der Ca-reichen Lamellen bei intermediären Plagioklasen festgelegt. Unterhalb eines Gesamtchemismus von $An_{47.0 \pm 1.1}$ werden keine Lamellen mit Anorthit-Struktur mehr erwartet. Dieses Ergebnis wird bei der Diskussion der Modellvorstellungen von großer Bedeutung sein.

2.5.4. Messung der integralen Intensitäten

Die Intensität der c- und d-Reflexe ist bei den hier zu untersuchenden Chemismen nicht auf ein kleines Volumenelement beschränkt, sondern verteilt sich, wie aus Noromosic- und simulierten Weissenberg-Aufnahmen zu ersehen ist, über weite Bereiche des reziproken Raumes. Aus diesem Grunde mußte für die Ermittlung der Intensitäten eine Meßstrategie entwickelt werden, die eine dreidimensionale Integration großer Volumina gewährleistet. Dabei war zu berücksichtigen, daß, wie aus der Ableitung der Teilchengrößen zu vermuten war, die zu untersuchende Streuung mit fallendem An-Gehalt immer schwieriger nachzuweisen sein würde. Wie aus Vorversuchen zu ersehen war, schieden bei üblichen Belichtungszeiten aufgrund des zu schlechten Intensitäts- zu Untergrundverhältnisses und der räumlichen Ausdehnung alle Verfahren mit bewegten Kristallen aus, ebenso wegen der zu hohen Meßzeiten pro Volumeneinheit die Aufnahme der Intensitätsverteilung mittels Einkristalldiffraktometer. So wurde auch hier eine Kombination von Noromosic- und simulierter Weissenberg-Technik verwendet.

Mittels Noromosic-Aufnahmen wurden im Abstand von zwei Grad Azimutdrehung Schnitte durch den reziproken Raum gelegt. Da die Diffusität der c- und d-Reflexe stark anisotrop ist - sie erstreckt sich überwiegend als wellenförmiges Band entlang der reziproken Richtung (010) - bilden die Noromosic-Aufnahmen bei der hier gewählten Orientierung der Kristalle Schnitte durch diese Richtung ab.

Für die dreidimensionale Integration wurde somit folgendes Verfahren entwickelt:

a) Aus den Serien von Noromosic-Aufnahmen wurden solche Reflexe ausgewählt, die anhand der simulierten Weissenberg-Aufnahmen immer den vollständigen Intensitätsverlauf b(e)-Reflex - diffuser c-Reflex - b(e)-Reflex zeigten und deren Abstand mehrere Schnitte ermöglichten. Diffuse d-Reflexe wurden wegen der zu geringen Intensität nicht berücksichtigt. Die untersuchten c-Reflexe sind in Tab. 6 aufgeführt.

b) Die Filmaufnahmen der einzelnen Schnitte wurden zweidimensional on-line photometriert.

c) Die zweidimensionalen Intensitätswerte der verschiedenen Schnitte bildeten nun unter Berücksichtigung der Azimutwinkel Stützpunkte, durch die mit Hilfe der Methode der kleinsten Fehlerquadrate Gaußkurven approximiert wurden. Die Flächen unter diesen Gaußkurven sind dabei ein Maß für die dreidimensionale integrale Intensität der c-Reflexe.

Zu diesem Verfahren seien noch einige ergänzende Bemerkungen angefügt.

Das Densitometer wurde über Camac-Einschübe von einem Rechner PDP 11/40 der Firma DEC gesteuert. Für die zweidimensionale Integration wurden Meß- und Auswertungsprogramme geschrieben. Bei der Messung auf einem Film wurden die zu integrierenden Flächen in Inkrementen von 0.02 mm^2 abgerastert, wobei die einzelnen Flächenelemente nahtlos aneinandergrenzten. Die Schwärzungen der einzelnen Elemente wurden dann mittels auf den jeweiligen Film aufgebrachter Schwärzungstreppen in Intensitäten umgerechnet. Diese Intensitätswerte wurden dann bezüglich des Untergrundes korrigiert, wobei insbesondere die Luftstreuung bei kleinen Beugungswinkeln berücksichtigt werden mußte. Anschließend wurden die Intensitäten der einzelnen Flächenelemente addiert.

In gleicher Weise wurde die dreidimensionale integrale Intensität aller interessierenden c-Reflexe der verschiedenen Proben erhalten. Ein typisches Beispiel für den Intensitätsverlauf entlang der reziproken Richtung $(0\bar{1}0)$ wird in Abb. 12 anhand des Reflexes $(26\bar{7})$ der Probe An_{75} gezeigt.

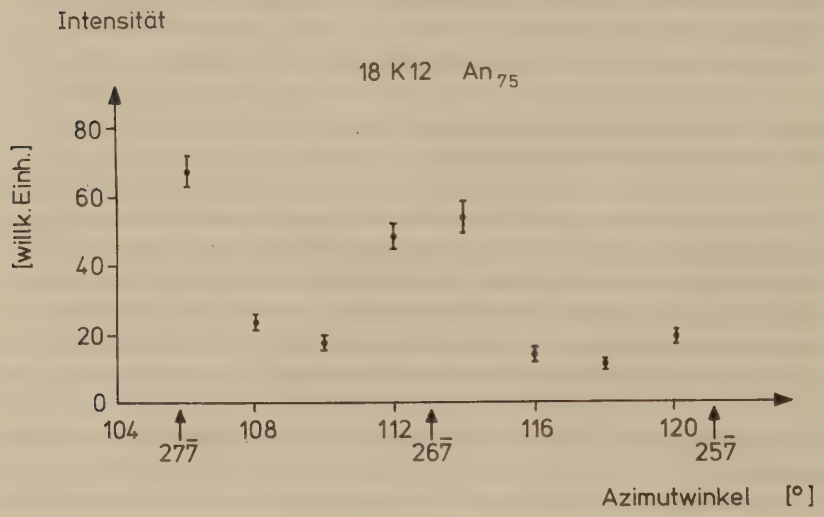

Abb. 12: Intensitätsverlauf des Reflexes $(26\bar{7})$ entlang der reziproken Richtung $(0\bar{1}0)$. Die einzelnen Meßpunkte entsprechen jeweils einer zweidimensionalen Integration auf einer Noromosic-Aufnahme (siehe Anhang E). Die Fehlerbalken entsprechen etwa dem $\sqrt{I}$-Gesetz.

Die anfallende Datenmenge bei diesem Verfahren ist äußerst hoch. In dieser Arbeit wurden je 13 c-Reflexe bei insgesamt 5 Proben untersucht. Im Mittel konnten entlang der reziproken Richtung (010) 8 Schnitte pro Reflex gelegt werden. Daraus

ergab sich eine Zahl von 13x5x8 = 520 Flächen, die auf Noromosic-Aufnahmen photometriert werden mußten. Üblicherweise wurden pro Fläche mit dem Densitometer etwa 2000 Schwärzungswerte gesammelt, so daß eine Information von $1x10^6$ Meßpunkten für 65 c-Reflexe zur Verfügung stand, die dann weiter verarbeitet wurde. Aufgrund dieser hohen Datenmenge wurde darauf verzichtet, alle Meßwerte in dieser Arbeit aufzulisten. Sie sind jedoch auf mehreren Magnetbändern archiviert und können auf Anforderung kopiert werden.

Zur Veranschaulichung dieses Verfahrens wird die vollständige Auswertung eines Reflexes (Reflex $(26\bar{7})$ der Probe An_{75}) im Anhang E durchgeführt.

Die so gewonnenen dreidimensionalen Intensitätssätze der diffusen c-Reflexe können nun nicht direkt in Abhängigkeit des Gesamtchemismus verglichen werden. Die Ursache liegt darin, daß die Intensität von Reflexen abhängig ist von der Größe der durchstrahlten Proben. Aus diesem Grund müssen die Volumina der untersuchten Kristalle aneinander skaliert werden.

2.5.5. Skalierung der integralen Intensitäten

Zu jedem Kristall wurde eine monochromatische Schwenkaufnahme mit einem Drehwinkel von ± 10 Grad angefertigt. Hierbei wurde darauf geachtet, daß für alle Aufnahmen identische Belichtungszeiten verwendet und das gleiche Gebiet des reziproken Raumes abgebildet wurde. Anhand der Strukturfaktoren F der Endglieder (Proben An_{52} und $An_{78.6}$) - diese Strukturfaktoren sind im Anhang B 3 und C 3 aufgelistet - wurden nun a-Reflexe gesucht, deren Abweichung der $F_{beob(achtet)}$ von den $F_{ber(echnet)}$ kleiner als 3 Prozent war und deren $F_{ber.}$ der Proben An_{52} und $An_{78.6}$ möglichst ähnlich waren. Zwischen diesen berechneten Strukturfaktoren wurden für die innerhalb dieser Grenzen gelegenen Kristalle deren Strukturfaktoren durch lineare Interpolation ermittelt. Diese Interpolation ist

sicher gerechtfertigt, da die Plagioklasstruktur im Bereich von An_{50} - An_{80} keine Diskontinuitäten aufweist und der gekoppelte Ersatz von Ca^{2+} und Al^{3+} anstelle von Na^{+} und Si^{4+} nur geringe Auswirkungen auf die Atomkoordinaten der gemittelten Struktur ausübt, wie ein Vergleich der Atomparameter im Anhang B 1 und C 1 zeigt.

Auf den Schwenkaufnahmen wurden nun die entsprechenden a-Reflexe on-line photometriert und anschließend die Datenreduktion vorgenommen, d. h. die Reflexe wurden über Schwärzungstreppen auf Intensitäten transformiert und korrigiert bezüglich Untergrund, Polarisations(P)-, Lorentz(L)- und Schrägheitsfaktor(S).

Allgemein lautet die Gleichung für die Bestimmung des Betrages der beobachteten Strukturfaktoren $F_{beob.}$ bei Schwenkaufnahmen:

$$\left|F_{beob.}\right| \sim \sqrt{\frac{I \cdot S}{P \cdot L}} \quad \text{, wobei gilt:}$$

I = Intensität der Reflexe.

$$S = \frac{1 - e^{-\mu d}}{1 - e^{\frac{-\mu d}{\cos \psi}}} \qquad /16/,$$

wobei μd sich zusammensetzt aus $\mu d = \mu_1 d_1 + \mu_2 d_2$. Die Werte $\mu_1 (\mu_2)$ sind die Absorptionskoeffizienten des Filmträgers (einer AgBr-Schicht), $d_1 (d_2)$ die Dicken des Filmträgers (einer AgBr-Schicht) und ψ der Winkel, der die Abweichung des Röntgenstrahls vom senkrechten Einfall auf den Film angibt. Das Produkt μd wurde durch Messungen mit dem Zählrohr erhalten.

$$P = \frac{1 + \cos^2 2\alpha \cdot \cos^2 2\vartheta}{1 + \cos^2 2\alpha} ,$$

mit α als Beugungswinkel des Röntgenstrahls am Monochromator. Dieser betrug bei dem verwendeten Germanium-Monochro-

mator mit der beugenden Netzebenenschar (111) $\alpha = 13.64^{\circ}$.
ϑ ist der Bragg-Winkel.

$$L = \frac{1}{(\sin^2 2\vartheta - \zeta^2)^{1/2}},$$

mit ζ als axialer Zylinderkoordinate des Films.

Aus den Quotienten der absoluten berechneten Strukturfaktoren und der aus den Schwenkaufnahmen ermittelten Beträge der gemessenen Strukturfaktoren lassen sich bezüglich der verschiedenen Kristalle Skalierungsfaktoren angeben. Diese Faktoren lauten für An_{52}: 0.40, $An_{58.5}$: 0.84, $An_{69.7}$: 1.69, An_{70}: 1.02 und An_{75}: 0.88. Da jedoch die Intensitäten und nicht die Strukturfaktoren proportional zum durchstrahlten Volumen sind, müssen diese Faktoren quadriert werden. Damit sind die unterschiedlichen Volumina der Kristalle aneinandergeeicht.

2.5.6. Abhängigkeit der integralen Intensität vom Gesamtchemismus

Mit diesen Skalierungsfaktoren wurden nun die aus Noromosic-Aufnahmen ermittelten Intensitäten der diffusen c-Reflexe multipliziert und somit unabhängig von den unterschiedlichen Volumina der Proben. Falls nun mit steigendem Gesamtchemismus die Ca-reiche Lamelle immer breiter und damit ihr Volumen zunehmen würde, sollte dies nicht nur, wie in Abschnitt 2.5.3. gezeigt, eine Verschärfung der Halbwertsbreiten bedeuten. In gleichem Maße sollten die integralen Intensitäten der c-Reflexe zunehmen. Der experimentelle Befund ist in Abb. 13 dargestellt.

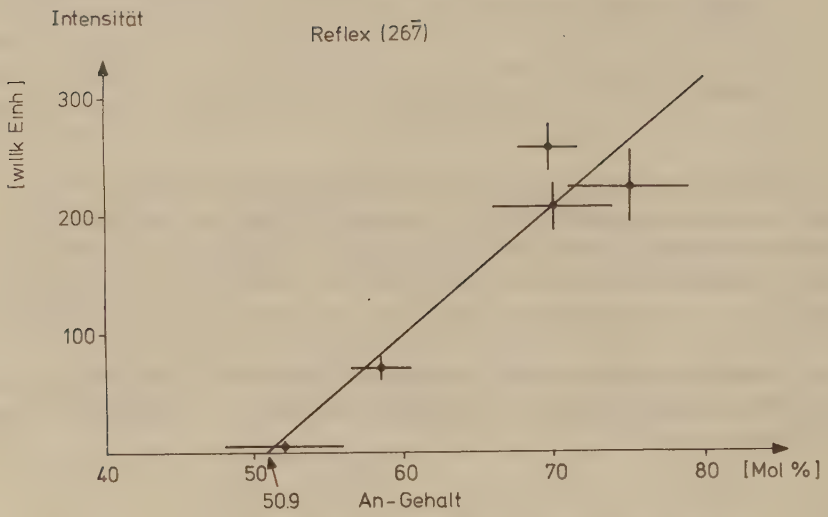

Abb. 13: Abhängigkeit der integralen Intensität des Reflexes (26̄7) vom Gesamtchemismus

Wie man aus obiger Abbildung erkennt, steigt die integrale Intensität dieses Reflexes mit zunehmendem An-Gehalt, d. h. die Zellenzahl in den Ca-reichen Lamellen wird vergrößert. Dabei ist jedoch keine Aussage getroffen über die Zahl und die Anordnung der Lamellen. Zweifellos können Gebiete existieren mit "weniger breiten" Ca-reichen Lamellen als auch mit "vielen schmalen" Lamellen. Dies wird überwiegend von der Genese der Proben abhängen.

Eine Zusammenfassung aller integralen Intensitäten wird in Tab. 9 gegeben.

Tab. 9: Integrale Intensität der skalierten c-Reflexe (Intensität in willkürlichen Einheiten)

hkl	An_{52} I	$An_{58.5}$ I	$An_{69.7}$ I	An_{70} I	An_{75} I
$\bar{4}\bar{6}\bar{7}$	3	20	1)	78	63
$\bar{4}4\bar{3}$	4	143	1)	2)	376
$\bar{3}\bar{7}\bar{9}$	3	72	68	167	160
$\bar{3}5\bar{3}$	11	39	32	154	122
$\bar{2}6\bar{5}$	12	97	222	249	181
$\bar{1}5\bar{3}$	30	94	449	380	485
$02\bar{1}\bar{5}$	91	433	2)	887	978
$06\bar{5}$	118	207	861	840	767
$26\bar{7}$	6	72	255	205	221
$35\bar{1}\bar{1}$	37	159	799	702	494
$46\bar{1}\bar{3}$	2	1)	202	243	274
$42\bar{7}$	2)	64	238	563	574
$44\bar{1}\bar{1}$	2)	420	877	625	515

1) Diese Reflexe konnten wegen Abschattung durch den Goniometerkopf auf dem Film nicht im gesamten Bereich b(e) - c - b(e)-Reflex verfolgt werden.

2) Bei diesen Reflexen konnte keine Kurve nach der Methode der kleinsten Fehlerquadrate gefittet werden. Gründe: Schlechter Datensatz wegen zu ungünstigen Intensitäts- zu Untergrundverhältnisses oder zu starker Einfluß der Nachbarreflexe (b-, e-Reflexe).

Ein besonderes Interesse gilt auch hier wieder der Frage, bei welchem An-Gehalt keine Ca-reichen Lamellen mehr erwartet werden. Dies ist gleichbedeutend - wie aus Abb. 13 ersichtlich - mit der Suche nach dem Gesamtchemismus, bei dem die Intensität der c-Reflexe gegen Null konvergiert. Diese Schnittpunkte der Ausgleichsgeraden mit der Abszisse, d. h. mit dem Gesamtchemismus sind in Tab. 10 gegeben.

Tab. 10: Grenze der integralen Intensität der c-Reflexe

hkl	Grenze An [Mol-%]	hkl	Grenze An [Mol-%]
$\bar{4}\bar{6}\bar{7}$	50.7	$06\bar{5}$	49.6
$\bar{4}4\bar{3}$	50.8	$26\bar{7}$	50.9
$\bar{3}\bar{7}\bar{9}$	49.9	$35\bar{11}$	50.2
$\bar{3}5\bar{3}$	50.3	$4\bar{6}\bar{13}$	51.7
$\bar{2}6\bar{5}$	48.4	$42\bar{7}$	56.7
$\bar{1}5\bar{3}$	51.8	$(44\bar{11}$	13.6)
$02\bar{15}$	48.5		
Mittelwert	ohne Reflex $44\bar{11}$: 50.8 ± 0.6 mit Reflex $44\bar{11}$: 47.9 ± 2.9		

Dieses Ergebnis zeigt, daß bei etwa $An_{50.8 \pm 0.6}$ (ohne Reflex $44\bar{11}$) keine integrale Intensität der c-Reflexe mehr vorhanden ist. Bei einem kleineren Gesamtchemismus als diesem Grenzwert dürften Ca-reiche Lamellen nicht mehr erwartet werden.

2.5.7. Die formalen Teilchengrößen der Ca-reichen Domänen

In Analogie zur Ermittlung der formalen Teilchengrößen aus Noromosic-Aufnahmen entlang der reellen Richtungen [100] und [001] (siehe Tab. 7) können aus simulierten Weissenberg-Aufnahmen Teilchengrößen längs der reziproken Richtung (010) aus den Halbwertsbreiten der approximierten Gaußkurven abgeleitet werden. Diese unterscheidet sich jedoch nur um etwa 4 Grad Raumwinkel von der reellen Richtung [010], so daß beide Richtungen in guter Näherung als parallel angesehen werden können. In Abb. 14 sind die Teilchengrößen entlang der drei Grundgittervektoren in Abhängigkeit des Gesamtchemismus aufgetragen.

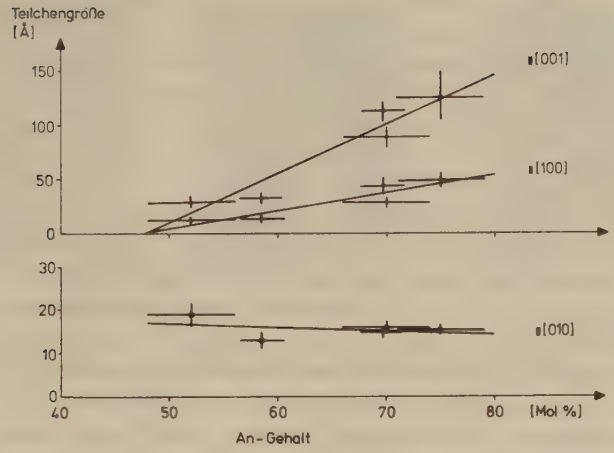

Abb. 14: Teilchengrößen der aus c- und d-Reflexen ermittelten Domänen in Richtung der Kristallachsen

Dabei zeigen sich charakteristische Unterschiede in den verschiedenen Richtungen. Während die Teilchengrößen parallel der Richtungen [100] und [001] mit steigendem An-Gehalt zunehmen, bleibt die Größe parallel [010] nahezu konstant.

Dieses verschiedene Verhalten ist jedoch verständlich. Wenn man an eine Ordnung in anorthitarme und anorthitreiche Bereiche glaubt, wird man feststellen, daß in der anorthitreichen Phase in Richtung [001] die kleinsten Kationenabstände Ca-Ca (etwa 7.1 Å) liegen. Damit gekoppelt muß auch eine Al/Si-Ordnung auftreten. Durch diese kleinsten Kationenabstände wird eine starke Kooperation erzeugt, so daß mit steigendem Gesamtchemismus bevorzugt die Domänen entlang dieser Richtung [001] wachsen dürften. In ähnlicher Weise läßt sich eine Kooperation in Richtung

[100] ableiten, während in Richtung [010] der Kationenabstand zu groß sein dürfte, um noch eine ordnende Kraft ausüben zu können. Die nahezu konstante Teilchengröße parallel der Richtung [010] erlaubt es auch, wie von Jagodzinski und Korekawa /21/ angewendet, die Überstrukturperiode nur in der a-, c-Ebene zu diskutieren.

Es sei noch darauf hingewiesen, daß die Größen der aus c- und d-Reflexen ermittelten Teilchen selbstverständlich nicht die Länge einer Gitterkonstanten in der betreffenden Richtung unterschreiten können. Somit soll die Extrapolation der Ausgleichsgeraden parallel der reellen Richtungen [100] und [001] in Abb. 14 nur den Gesamtchemismus anzeigen, unterhalb dessen keine anorthitreichen Teilchen mehr auftreten. Auch ist der Begriff "Teilchengröße" bei niederen An-Gehalten (etwa kleiner als An_{55}) nicht mehr angebracht, da hier im Mittel die Abmessungen einer einzigen Anorthitzelle erreicht werden.

2.6. Die diffusen b-Reflexe

Bei allen untersuchten Proben wurde auf Noromosic-Aufnahmen in der Umgebung einiger b- bzw. e-Reflexe eine diffuse Streuung beobachtet, die bereits von Jagodzinski und Korekawa /20,21,22/ an Plagioklasen mit einem Gesamtchemismus von etwa An_{80} bis nahezu An_{100} beschrieben wurde. Damit ist dieser Effekt nicht auf intermediäre Plagioklase beschränkt, sondern wurde im gesamten Bereich von etwa An_{50} bis annähernd An_{100} nachgewiesen.

In den Abb. 15a - e wird die diffuse Streuung in der Umgebung der b- bzw. e-Reflexe mit den Indizes $(3\bar{6}\bar{5})$ gezeigt.

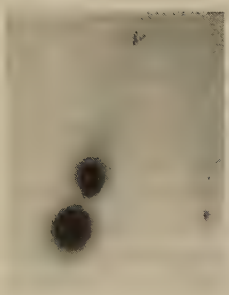

Abb. 15a: An_{52}
(e-Satelliten)

Abb. 15b: $An_{58.5}$
(e-Satelliten)

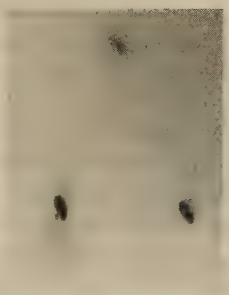

Abb. 15c: $An_{69.7}$
(b-Reflex)

Abb. 15d: An_{70}
(b-Reflex)

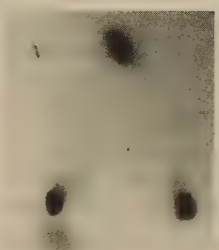

Abb. 15e: An_{75}
(b-Reflex)

Abb. 15a - e:

Ausschnitte von Noromosic-Aufnahmen verschiedenen Chemismus mit der Umgebung des Reflexes ($3\bar{6}\bar{5}$). Neben dem b(e)-Reflex in den linken unteren Bildhälften ist der a-Reflex ($3\bar{5}\bar{4}$) abgebildet. Bei höheren Chemismen wird in den oberen Bildhälften der diffuse c-Reflex ($2\bar{6}\bar{3}$) sichtbar.

Während die diffuse Streuung bei den Proben An_{52} und $An_{58.5}$ (Abb. 15a, b) nur als schwache Ausschwärzung entlang der reziproken Richtung ($\bar{1}02$) zu erkennen ist, wird bei höheren An-Gehalten (Abb. 15c - e) eine deutliche Strukturierung in Form von diffusen Fächern sichtbar. Diese diffuse Streuung ist nun, wie aus simulierten Weissenberg-Aufnahmen zu erkennen ist, entlang der reziproken Richtung (010) mit den benachbarten diffusen c-Reflexen verbunden. Auch deutet sich bei manchen diffusen Fächern innerhalb einer Noromosic-Aufnahme eine schwache Ankopplung entlang der reziproken Richtung ($\bar{1}02$) zum nächsten c-Reflex an. Da damit diese diffusen Effekte bei allen Chemismen mit den c-Reflexen korreliert sind, wären eine mögliche Ursache dieser Streuung die Grenzflächen der Überstrukturen bzw. der Antiphasendomänen. Da bei intermediären Plagioklasen in Grenzflächen immer chemische und strukturelle Unterschiede der verschiedenen Phasen kompensiert werden müssen und somit in diesen Zwischenzonen äußerst komplexe Atomanordnungen zu erwarten sind, dürfte eine Analyse der diffusen Fächer ohne genaue Vorstellung dieser Gebiete mit großen Schwierigkeiten verbunden sein.

Auch die b-Reflexe selbst zeigen ein von den a- und c-Reflexen unterschiedliches Verhalten. Obwohl b-Reflexe bei den hier untersuchten chemischen Zusammensetzungen nur bei den Proben $An_{69.7}$, An_{70}, An_{75} gefunden wurden, sind vereinzelt b-Reflexe auch bei anderen Proben mit An-Gehalten zwischen An_{50} und An_{60} beobachtet worden. Auch sind Kristalle mit nahezu gleichem Chemismus, jedoch verschiedener Genese bekannt, bei denen je nach Abkühlungsbedingungen b-Reflexe unterschiedliches Verhalten in ihrer Schärfe zeigten. Teilweise waren sie sogar ausgelöscht /65/.

Dieser Effekt wird vermutlich am besten als Fehlordnungsproblem behandelt werden. In diese Richtung dürfte auch eine Arbeit von Jagodzinski und Korekawa /24/ zielen, in der anhand des generalisierten Modells /23/ gezeigt wird, daß die Auslöschung von b-Reflexen besonders bei chemischen Zusammensetzungen nahe des Bytownits nicht genau erfüllt sein kann. Offensichtlich spielen hier statistische Anordnungen der Lamellen, konstante- bzw. variable Dicken der Lamellen eine wichtige Rolle.

2.7. Eine neue Überstruktur bei Plagioklasen

2.7.1. Messungen

Im Laufe der Messungen an c- und d-Reflexen wurde auf Noromosic-Aufnahmen ein neuer Typ von Satelliten entdeckt. Diese wurden nur um a-Reflexe mit hohen Strukturfaktoren beobachtet. Da diese Satelliten sich nicht auf das Gebiet der intermediären Plagioklase zu begrenzen schienen, wurden noch einige Ca-reichere Kristalle bis hin zum reinen Anorthit (Vorkommen: Val Pasmeda/Italien), außerdem zusätzlich einige lunare Proben untersucht.

In Abb. 16a - f sind Satellitenreflexe verschiedener Proben vergrößert dargestellt:

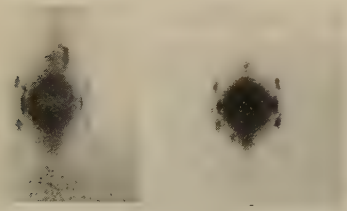

Abb. 16a:
An_{50}, Reflex (040), Drehachse [100], Ge-Monochromator, Bel.Zeit 22 h

Abb. 16b:
An_{70}, Reflex $(0\bar{4}0)$, Drehachse [100], SiO_2-Monochromator, Bel.Zeit 24 h

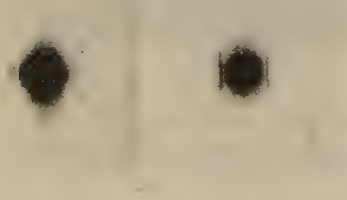

Abb. 16c:
An_{75}, Reflex $(0\bar{4}0)$, Drehachse [100], Ge-Monochromator, Bel.Zeit 22 h

Abb. 16d:
Monte Somma/Italien, $An_{97.5}$, Reflex (004), Drehachse $[\bar{1}00]$, Ge-Monochromator, Bel.Zeit 4 h

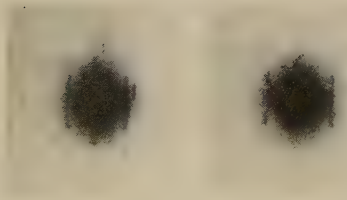

Abb. 16e:
$An_{78.6}$, Reflex (040), Drehachse $[\bar{1}00]$, Ge-Monochromator, Bel.Zeit 22 h

Abb. 16f:
$An_{78.6}$, Reflex (040), Drehachse [001], Ge-Monochromator, Bel.Zeit 60 h

Alle Aufnahmen wurden mit $CuK\alpha_1$-Strahlung, 40 kV und 20 mA aufgenommen.

Eine genaue Untersuchung an verschiedenen Proben zeigte, daß diese Anordnung der Satelliten in der deutlichen Ausbildung wie etwa in Abb. 16a und b relativ selten vorhanden war. Häufiger wurden nur die beiden den zentralen a-Reflexen am nächsten gelegenen, symmetrischen Satellitenreflexe beobachtet. Insbesondere bei lunaren Plagioklasen wurden nur jeweils zwei Satelliten entdeckt. Offenbar spielen häufige Temperaturunterschiede und damit verbundene Ordnungs-Unordnungsvorgänge eine bedeutende Rolle für die Überstrukturreflexe. Überraschenderweise konnten diese Satelliten auch durch Beschuß des Kristalls mit Röntgenstrahlen beeinflußt werden.

In Abb. 17a, b ist jeweils das gleiche Gebiet des reziproken Gitters um den Reflex $(0\bar{4}0)$ der Probe An_{70} abgebildet.

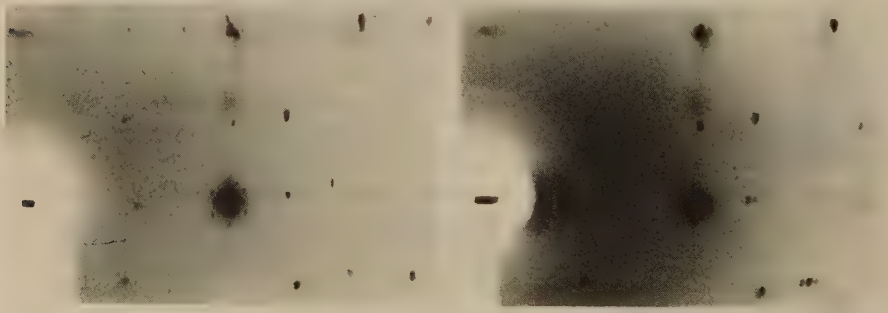

Abb. 17a, b:

Ausschnitt zweier Noromosic-Aufnahmen der Probe An_{70}

a) Aufnahme zu Beginn einer Noromosic-Serie

b) Aufnahme am Ende einer Untersuchungsreihe, d. h. der Kristall war etwa 3 Monate den Röntgenstrahlen ausgesetzt.

Beide Aufnahmen wurden mit $CuK\alpha_1$-Strahlung, 40 kV, 20 mA und SiO_2-Monochromator aufgenommen. Drehachse des Kristalls war die reelle Achse $[100]$. Die Belichtungszeiten betrugen bei Aufnahme a(b) 24(22) Stunden.
Auf beiden Aufnahmen ist in Analogie zu den Bildern im Anhang A 1 eine schwache diffuse Streuung beobachtbar, die vom Zentralreflex $(0\bar{4}0)$ über den schwachen Reflex $(1\bar{4}\bar{1})$ zum a-Reflex $(2\bar{4}\bar{2})$ läuft.

Offensichtlich wird die Überstruktur des Kristalls bereits durch niederenergetische Röntgenstrahlen gestört, so daß die Intensität dieser Satellitenreflexe bei längerer Belichtungszeit in den diffusen Untergrund verschmiert.

2.7.2. Auswertung der Noromosic-Aufnahmen

a-Reflexe, bei denen diese Satelliten gefunden wurden, wurden mit einem Mikrodensitometer teils on-line, teils off-line photometriert. Eine typische on-line Auswertung des Reflexes ($0\bar{4}0$) aus Abb. 16b zeigt Abb. 18.

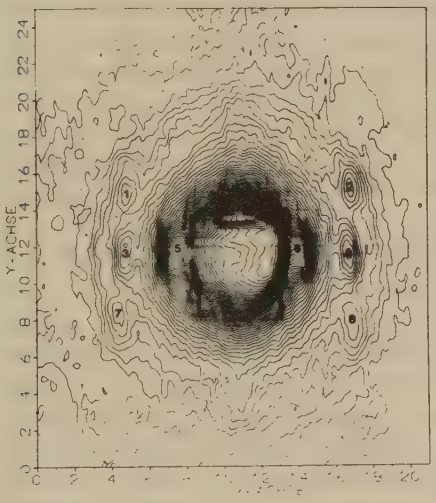

Abb. 18:
Plot des Reflexes ($0\bar{4}0$) der Probe An_{70}.
Photometerauflösung $0.2 \times 0.4 mm^2$.
Höhenlinien-Abstand von 0.1 D optischer Dichte. Die einzelnen Maxima der Satelliten sind durch Nummern gekennzeichnet.

Dabei erhält man - bezogen auf Abb. 18 - folgende in Tab. 11 aufgeführte formale Indizierung:

Tab. 11: Indizierung der Satelliten

Nummer der Satelliten	h	k	l
1	0.13	-3.69	-0.03
2	0.13	-4.30	-0.18
3	0.00	-3.72	0.07
4	0.00	-4.28	-0.08
5	0.00	-3.83	0.04
6	0.00	-4.17	-0.04
7	-0.13	-3.69	0.17
8	-0.13	-4.30	0.01

Errechnet man Zellgrößen $T = \frac{1}{|\vec{t}|}$ mit

$$\vec{t} = (h_1 - h_2)\vec{a}^* + (k_1 - k_2)\vec{b}^* + (l_1 - l_2)\vec{c}^*,$$

wobei $h_1k_1l_1$, $h_2k_2l_2$ die Indizes der Satelliten und $\vec{a}^*$, $\vec{b}^*$, $\vec{c}^*$ die reziproken Gittervektoren darstellen, erhält man die in Tab. 12 aufgeführten Werte, die aus den aus Tab. 11 entnommenen Indizes ermittelt wurden.

Tab. 12: Zellgrößen aus dem Abstand zweier Satelliten

Nummern der Satelliten	Zellgröße T [Å]
1 - 2	20(1)
3 - 4	22(1)
5 - 6	36(1)
7 - 8	20(1)
1 - 7	32(1)
2 - 8	32(1)

Dabei entsprechen die aus den Satellitenreflexen 1 - 7 und 2 - 8' ermittelten Richtungen exakt der reellen Richtung [100]. Die Richtung der Satellitenreflexe 3 - 4 bzw. 5 - 6 läuft in naher Umgebung des Reflexes ($0\bar{4}0$) etwa parallel der reziproken Richtung (010) und damit ungefähr parallel zum reellen Gittervektor $\vec{b}$.

Die formale Indizierung der Satelliten im gesamten Mischungsbereich zeigt, daß diese ihre Lage nur unwesentlich ändern. Damit verbunden werden auch keine starken Variationen der Zellgrößen in Abhängigkeit des Gesamtchemismus beobachtet.

2.7.3. Ergebnisse und ihre Diskussion

Es zeigt sich aus Noromosic-Aufnahmen unterschiedlichen Chemismus, daß die gesamte Satellitenanordnung oder nur einzelne Satelliten bei Plagioklasen im Bereich von An_{50} - An_{100} auftreten. Während einige Proben scharfe Satellitenreflexe zeigen (siehe Abb. 16a, b), weisen andere diffuse und miteinander verbundene Reflexe auf (Abb. 16d). Offenbar ist die Genese der Proben von großer Bedeutung.

Die Satelliten treten nur bei a-Reflexen mit hohem Strukturfaktor auf. An b-, c-, d-Reflexen konnte dieser Effekt nicht nachgewiesen werden. Die Anordnung der Satelliten zeigt ähnliche Geometrie und Struktur im gesamten untersuchten Bereich. Daraus folgt, daß ein Modell eingeführt werden muß, das nahezu gleiche Gestalt im Bereich von An_{50} - An_{100} besitzt. Aus dem diffusen Ring, der die äußeren Satellitenreflexe teilweise verbindet (Debye-Scherrer-Ring ?), läßt sich eine mögliche "Flüssigkeitsstruktur" der Teilchen ableiten.

Die Satellitenreflexe sind nicht auf eine reziproke Ebene beschränkt, sondern liegen dreidimensional um den jeweiligen Bragg-Reflex. Man erkennt dies aus den Abb. 16e, f. Dabei wurde ein

Kristall auf zwei verschiedene Achsen geklebt und jeweils der Reflex (040) untersucht.

Die Halbwertsbreiten der Satelliten lassen keine Abhängigkeit als Funktion des Glanzwinkels oder Gesamtchemismus erkennen.

Eine Vortäuschung der Satellitenanordnung durch Mehrfachstreuung (Umweganregung) bzw. Verzwilligung scheidet aus, da die Proben teilweise mit unterschiedlichen Zonenachsen ([100], [$\bar{1}$00], [001]) aufgeklebt waren und sowohl verzwilligte wie auch unverzwilligte Proben untersucht wurden.

Versucht man diese Satellitenreflexe in Beziehung zu setzen zu den bei intermediären Plagioklasen bekannten Charakteristika wie diffuse c-, d-Reflexe, e-, f-Satelliten, Supersatelliten, Aufspaltung von a-Reflexen, lassen sich folgende Schlüsse ziehen:

a) Die formalen Gitterkonstanten bzw. Zellgrößen sind in den Bereichen kleiner Anorthitdomänen größer als diese Domänen selber, d. h. es besteht mit ihnen kein Zusammenhang.

b) Die überstrukturartigen Reflexe zeigen keine Supersatelliten, d. h. es besteht auch kein Zusammenhang mit diesen großen Domänen.

c) Es sind auch keine Entmischungserscheinungen in dem Sinn, daß zwei Feldspäte mit etwas verschiedenem An-Gehalt vorliegen.

Dennoch muß diesen Satellitenreflexen ein wesentliches strukturelles Merkmal zugrunde liegen, da die Intensitäten dieser Reflexe im gesamten untersuchten Bereich sehr ähnlich verlaufen. Eine mögliche Erklärung wäre in der Anordnung der Ca/Na-Atome zu suchen. Offenbar können azentrische Domänen, die überwiegend auf die Anordnung der Großkationen Kalzium und Natrium zurückzuführen sind, bei intermediären Plagioklasen nicht ausgeschlossen werden (siehe

Toman und Frueh /72/). Auch aus elektrostatischen Überlegungen wären Ca/Na-Paare unter Verlust des Symmetriezentrums gleichartigen Paaren vorzuziehen (Jagodzinski /22/), so daß zumindest in kleinen Bereichen azentrische Domänen durchaus möglich erscheinen. Damit wären die Satellitenreflexe auf eine Verteilung dieser azentrischen Domänen zurückzuführen. Ob die treibende Kraft für die Entstehung dieser Domänen statischer oder dynamischer Natur ist, ist schwer zu entscheiden. Mit großer Wahrscheinlichkeit sind die Domänen bei niederen An-Gehalten statisch, während bei hohen An-Gehalten die dynamische Komponente an Bedeutung gewinnt (Adlhart et al. /2/, Jagodzinski /22/).

Kapitel 3

Diskussion der Modellvorstellungen bei intermediären Plagioklasen unter besonderer Berücksichtigung der Messungen an diffusen c- und d-Reflexen

3.1. Übersicht der Meßergebnisse

Für die Diskussion der verschiedenen Modelle seien die wichtigsten Meßergebnisse dieser Arbeit kurz zusammengefaßt:

a) Die Halbwertsbreiten von c- und d-Reflexen nehmen im Mittel mit steigendem Gesamtchemismus parallel der reellen Richtungen [100] und [001] ab. Damit verbunden ist eine Zunahme der Teilchengrößen entlang dieser Achsen. Die Ausgleichsgeraden lassen unter einem An-Gehalt von $An_{47.0 \pm 1.1}$ keine c- und d-Reflexe mehr erwarten.

b) Die integralen Intensitäten der c-Reflexe nehmen mit steigendem Gesamtchemismus zu. Auch hier zeigt eine Extrapolation von Ausgleichsgeraden, daß bei einem niedrigeren An-Gehalt als $An_{50.8 \pm 0.6}$ keine c-Reflexe mehr beobachtet werden dürften.

c) Aus Gitterkonstantenmessungen läßt sich eine röntgenographische Zweiphasigkeit ableiten. Die beiden Phasen, deren Dicken im Bereich einiger Zellkonstanten liegen, besitzen unterschiedlichen Chemismus, der für Phase I etwa An_{60} und für Phase II etwa An_{90} beträgt. Jedoch wird der wahre Chemismus beider Phasen aufgrund der lamellaren Anordnung und der geometrischen Anpassung der Gitterkonstanten an den Grenzflächen noch eine größere Differenz aufweisen.

Aus diesen Ergebnissen wird oberhalb eines Gesamtchemismus von etwa An_{50} eine lamellare Anordnung von Labradorit und Bytownit bzw. Anorthit erwartet. Unterhalb dieses Pauschalchemismus dürf-

ten Fehlordnungsvorgänge eine große Rolle spielen, da die e-Satelliten zunehmend diffuser werden.

3.2. Klassifizierung der Modelle

Die in den Abschnitten 1.3.3.1. - 1.3.3.8. vorgestellten Modelle lassen sich in zwei Gruppen unterteilen:

a) Modelle qualitativer Art
b) Modelle quantitativer Art.

Gruppe b) kann nochmals unterteilt werden in

ba) Modelle, deren Endglieder aus albit- und bytownit- bzw. anorthitähnlichen Lamellen bestehen.

bb) Ein Modell mit den Endgliedern Labradorit und Bytownit bzw. Anorthit.

Dabei soll die Klassifizierung in dem Sinne verstanden werden, daß bei quantitativen Modellen Strukturanalysen der Überstrukturzelle durchgeführt wurden, bei den qualitativen Modellen jedoch nicht. Bei dieser Einteilung - die keine Wertung darstellen soll - ist zu berücksichtigen, daß die Autoren, die die ersten Modelle aufgrund scharfsinniger Überlegungen ableiteten (siehe Chao und Taylor (1940), Megaw (1960)), keine Möglichkeiten hatten, ihre Modellvorstellungen mit Digitalrechnern zu überprüfen und Strukturverfeinerungen der Überzelle durchzuführen.

Die qualitativen Modelle sind den Arbeiten von Chao und Taylor (Abschnitt 1.3.3.1.), Megaw (1.3.3.2.), Smith und Ribbe (1.3.3.4.), Cinnamon und Bailey (1.3.3.6.) und McConnell (1.3.3.7.) entnommen. Die quantitativen Modelle mit den Endgliedern der Überstruktur Albit und Bytownit bzw. Anorthit stammen von Toman und Frueh (1.3.3.5.) und Kitamura und Morimoto (1.3.3.8.), während die Mo-

dellvorstellung mit den Endgliedern Labradorit und Bytownit bzw. Anorthit von Korekawa und Jagodzinski (1.3.3.3.) abgeleitet wurde.

Da zum Zeitpunkt dieser Arbeit nur noch die Modelle diskutiert werden, die durch Strukturverfeinerungen belegt sind, wird auf die anderen Arbeiten im folgenden nur kurz eingegangen.

3.3. Anmerkungen zu den qualitativen Modellen

Die Modelle von Chao und Taylor und Smith und Ribbe sind nicht im Einklang mit den Messungen dieser Arbeit, da diese Autoren eine Lamellenanordnung mit Albit- und Anorthit-Strukturen ableiten. Mit dieser Zusammensetzung müßten unterhalb eines Gesamtchemismus von etwa An_{50} c- und d-Reflexe auftauchen. Diese werden nicht beobachtet. Auch die Teilchengrößenmessungen entsprechen nicht dieser Konfiguration.

Auch das Modell von Megaw ist nicht geeignet, da die Halbwertsbreitenmessungen der c- und d-Reflexe nur schwer mit Stapelfehlern in Beziehung zu setzen sind. Andere Autoren /61/ zeigten auch, daß der von Megaw vorhergesagte Al- und Si-Gehalt auf den T-Plätzen nicht mit den experimentell bestimmten Werten übereinstimmt.

Cinnamon und Bailey, die als einzige Autoren die Domänen entlang der kristallographischen Hauptachsen als unabhängig betrachten und nicht eine Modulation annehmen, errechnen Domänengrößen, die in keiner Beziehung zu den in dieser Arbeit durchgeführten Messungen der Teilchengrößen stehen.

Zu den Ausführungen von McConnell, der anhand von hydrothermalen Experimenten Aussagen über die Stabilitätsbereiche der intermediären Plagioklase macht, kann bezüglich der röntgenographischen Ergebnisse keine Stellung genommen werden, da keine Angaben zur Kristallstruktur gegeben werden.

3.4. Vergleich der quantitativen Modelle mit den Ergebnissen dieser Arbeit

3.4.1. Diskussion des Modells von Toman und Frueh

Toman und Frueh postulieren albit- und anorthitähnliche Einheiten mit Übergangszonen.

Dieses theoretische Modell steht damit im Widerspruch zu den Ergebnissen dieser Arbeit, da hier - wie die Experimente zeigten - bei einem niedrigeren An-Gehalt als etwa An_{50} keine Anorthitlamellen mehr erwartet werden. Auch ist die Aufspaltung der a-Reflexe zu gering, um einen Chemismusunterschied dieser Größenordnung rechtfertigen zu können. Gegen ihre Strukturverfeinerung seien ebenfalls Vorbehalte angebracht. Obwohl der R-Wert der e-Satelliten mit R = 0.215 vergleichbar ist dem R-Wert der e-Satelliten von Korekawa und Jagodzinski mit R = 0.21, ist der R-Wert der a-Reflexe mit R = 0.071 deutlich höher. Korekawa und Jagodzinski erzielten für die a-Reflexe einen R-Faktor von R = 0.028. Zusätzlich werden in dem Modell von Toman und Frueh die Auslöschungen der Satelliten höherer Ordnung nicht berücksichtigt.

Aus der Strukturanalyse wird deutlich, daß in ihrem Modell eine harmonische Verschiebungswelle den Hauptbeitrag zu den Intensitäten der Satelliten liefert. Eine harmonische Verschiebungswelle erzeugt jedoch Satelliten höherer Ordnung. Diese werden nicht beobachtet.

3.4.2. Diskussion des Modells von Kitamura und Morimoto

Dieses Modell, das auf den Überlegungen von Chao und Taylor basiert, besteht aus Lamellen mit der chemischen Zusammensetzung von etwa An_5 und An_{80}.

Damit ist ihr Strukturvorschlag nicht in Übereinstimmung mit den Messungen dieser Arbeit. In Analogie zu dem Modell von Chao und Taylor müßten auch hier bei einem niedrigeren An-Gehalt als etwa An_{50} c- und d-Reflexe auftauchen. Von Kitamura und Morimoto werden in dem von ihnen untersuchten Bereich keine Reflexe dieser Art beobachtet. Auch eine Aufspaltung von a-Reflexen müßte bei diesen Chemismusunterschieden (die Differenz im γ- bzw. γ^*-Winkel würde etwa 3 Grad betragen) deutlich sichtbar sein.

Ihre Strukturanalyse muß mit einiger Vorsicht betrachtet werden. Der gemittelte R-Wert von R = 0.24 für a- und e_1 -Reflexe bzw. R = 0.31 unter Einbeziehung der ausgelöschten Satelliten - wobei hier höchstwahrscheinlich nur die ausgelöschten e_1-Satelliten eingeschlossen sind - ist deutlich höher, verglichen mit dem R-Wert von R = 0.047 von Korekawa und Jagodzinski.

Die Überstruktur von Kitamura und Morimoto enthält 117 Atome. Somit müssen unter Einschluß von 9 Temperaturfaktoren und 2 Skalierungsfaktoren (für a- und e_1-Reflexe) 362 Parameter unabhängig verfeinert werden. Üblicherweise wird bei Strukturverfeinerungen etwa eine 10-fache Überbestimmung gefordert. Aus diesem Grunde sollten ungefähr 3600 Reflexintensitäten bekannt sein. Gemessen wurden bei dem angegebenen R-Wert von R = 0.24 nur 642 Reflexintensitäten.

Ihre angegebene Kombination einer Verschiebungswelle der Periode M und einer Dichtewelle der Periode $\frac{M}{2}$ muß Satelliten aller Ordnungen erzeugen. Diese werden röntgenographisch nicht beobachtet.

3.4.3. Diskussion des Modells von Korekawa und Jagodzinski

Dieses Modell, das als einziges im Bereich von An_{50} - An_{75} eine Lamellenstruktur aus Labradorit- und Bytownit- bzw. Anorthiteinheiten annimmt, ist in guter Übereinstimmung mit den Ergebnissen

dieser Arbeit. Es erklärt, daß bei einem niedrigeren Gesamtchemismus als etwa An_{50} keine c- und d-Reflexe mehr gefunden werden. Auch ist es konsistent mit den Messungen der integralen Intensitäten von c-Reflexen. Die Größe der Aufspaltung von a-Reflexen und die Gittermetrikbestimmung mit c-Reflexen entspricht den theoretisch geforderten Chemismusunterschieden beider Phasen.

Ein Vergleich der von dieser Theorie geforderten Domänengrößen der Ca-reichen Phase mit den experimentell bestimmten Teilchengrößen zeigt jedoch eine Diskrepanz, wie in Tabelle 13 aufgeführt wird.

Tab. 13: Vergleich von theoretisch und experimentell bestimmten Teilchengrößen der Ca-reichen Phase

Gesamtchemismus An [Mol-%]	Kristallrichtung [uvw]	theor. Wert [Å]	exp. Wert [Å]
50	100	0	~0
50	001	0	~0
75	100	64	~50
75	001	28	~120

Die experimentellen Werte sind der Abb. 14 entnommen.

Während in Richtung [100] eine gute Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment festzustellen ist, ist die Abweichung in Richtung [001] außerhalb eines möglichen Meßfehlers.

Es kann jedoch gezeigt werden, daß die c- und d-Reflexe nicht nur, wie von Laves und Goldsmith /41/ angenommen, von der Ca/Na-Verteilung kontrolliert werden. Teilt man die Strukturfaktoren der c- und d-Reflexe des reinen Anorthits auf in die Streuanteile der

Kalzium-, Aluminium/Silizium- und Sauerstoff-Atome, stellt man fest, daß auch die Beiträge der Gerüstatome beträchtlich sein können. Einige Strukturfaktoren von c- und d-Reflexen sind in Tab. F 2 in ihre einzelnen Komponenten zerlegt.

Da nun insbesondere in Richtung [001] eine starke Kooperation und Ankopplung der Al/Si-Atome an die Ca/Na-Ordnung besteht - in dieser Richtung liegen bekanntlich die kürzesten Großkationenabstände -, wäre eine mögliche Erklärung, daß mit Hilfe des Gerüsts die für die c-Reflexe erforderliche Atomanordnung über benachbarte Lamellen erhalten bleibt und somit zu breite Teilchen in Richtung [001] vorgetäuscht werden.

Auch sind Anhäufungen im Sinne größerer Labradorit- und Anorthitgebiete nicht auszuschließen, womit auch die Teilchengrößen ansteigen würden.

Interessanterweise entsprechen die ermittelten Teilchengrößen bei einem Gesamtchemismus von An_{75} ungefähr den Werten, die bei Plagioklasen mit etwas höherem An-Gehalt auftreten, die jedoch keine Satelliten mehr zeigen /19/. Damit ist ein kontinuierlicher Übergang zwischen der Lamellenstruktur der intermediären Plagioklase und den Antiphasendomänen bei Bytowniten hergestellt.

Zusammenfassung

Plagioklase mit der chemischen Formel $(Ca_xNa_{1-x})[(Al_{1+x}Si_{3-x})O_8]$, $0 \leq x \leq 1$, gehören als wichtigste gesteinsbildende Minerale zu den Zweistoffsystemen, die seit vielen Jahren intensiv untersucht werden. Während das Endglied Anorthit ($CaAl_2Si_2O_8$, An_{100}, $x = 1$) selbst auf lange belichteten Aufnahmen nahezu fehlordnungsfreie Beugungsbilder zeigt, wird bereits beim Albit ($NaAlSi_3O_8$, An_0, $x = 0$) diffuse Röntgenstreuung beobachtet. Insbesondere weisen jedoch die Beugungsbilder der Zwischenglieder Satelliten, diffuse Streuung, Aufspaltung von Reflexen und Grenzflächenstreuung auf.

Als Ursache für diese komplexen Beugungscharakteristika wird der gekoppelte Ersatz von Ca^{2+} und Al^{3+} für Na^+ und Si^{4+} angenommen, der jedoch aus kinetischen und strukturellen Gründen keine vollständige Mischbarkeit ermöglicht, sondern Überstrukturen, Antiphasendomänen, Fehlordnung, Entmischungen und Verzwilligungen erzeugt.

Ein charakteristisches Merkmal für die intermediären Plagioklase, d. h. für das Gebiet von etwa An_{25} - An_{75}, ist das Auftreten von Satellitenreflexen (e-, f-Satelliten). Im Bereich dieser chemischen Zusammensetzung sind bis heute aufgrund der komplizierten Ordnungs- Unordnungsvorgänge acht verschiedene Modellvorstellungen entwickelt worden.

Um diese Theorien überprüfen zu können, muß insbesondere die diffuse Streuung röntgenographisch nachgewiesen und quantitativ bestimmt werden. Diese Intensitäten sind jedoch im hier interessierenden Bereich von An_{50} - An_{75} äußerst gering. Mit Hilfe von streng monochromatischen Beugungsverfahren, die hohe Überbelichtungen (Noromosic- und simulierte Weissenberg-Technik) erlauben, wurden diffuse Reflexe von Kristallen unterschiedlichen Chemismus aufgenommen und die stark anisotrope diffuse Streuung bezüglich ihrer Lage im reziproken Raum und ihrer integralen Intensi-

tät quantitativ analysiert.

Diese Ergebnisse erlaubten nun, die unterschiedlichen Modellvorstellungen zu vergleichen und auf ihre Übereinstimmung mit den Messungen dieser Arbeit zu überprüfen. Dabei zeigte sich, daß genau ein Modell (Korekawa und Jagodzinski) mit den experimentellen Daten in Einklang zu bringen ist /58/.

Im Laufe der Untersuchungen wurden zwei Strukturverfeinerungen von Kristallen unterschiedlichen Chemismus (An_{52}, $An_{78.6}$) durchgeführt. Die Messungen bestätigen die von Klein (An_{52}) /32/ und von Fleet et al. (An_{80}) /13/ abgeleiteten Strukturen. Dabei wurde jedoch aufgrund der heute möglichen Meßmethoden eine bessere Übereinstimmung zwischen beobachteten und berechneten Strukturfaktoren erzielt. Zusätzlich wurden in Erweiterung der Ergebnisse von Fleet et al. die Temperaturfaktoren anisotrop verfeinert.

Eine neue Art von Satellitenreflexen wurde auf lang belichteten Filmaufnahmen im Bereich von An_{50} - An_{100} entdeckt /59/. Diese werden in charakteristischer Weise nur um Reflexe mit hohen Strukturfaktoren beobachtet. Die Ursache dieser Satellitenreflexe könnte aus einer Verteilung von azentrischen Domänen stammen.

Anhang A Röntgenaufnahmen intermediärer Plagioklase (An_{52} - An_{75})

A 1: Noromosic-Aufnahmen

Die in Abbildungen A 1a - e gezeigten Beugungsbilder verschiedener intermediärer Plagioklase wurden mit $CuK\alpha_1$-Strahlung, 40 kV, 20 mA, Ge-Monochromator und 22 Stunden Belichtungszeit aufgenommen. Der streng monochromatische Röntgenstrahl war auf den Kristall fokussiert. Die Abbildungen A 1c - e sind gegenüber den Abbildungen A 1a und b um 180 Grad gedreht. Der Grund liegt darin, daß die Kristalle mit unterschiedlichen Drehachsen ([100] bzw. $[\bar{1}00]$) aufgeklebt waren. Die starke diffuse Streuung der Aufnahmen bei kleinen Beugungswinkeln rührt überwiegend von Lufstreuung in der Kamera her.

Die Noromosic-Aufnahmen bilden jeweils den gleichen Schnitt durch das reziproke Gitter ab. Dabei zeigt sich, daß die diffusen Beugungscharakteristika im gesamten untersuchten Bereich nahezu unverändert bleiben.

Auf allen Aufnahmen sind c-Reflexe (bei Abb. A 1e zusätzlich ein d-Reflex $(16\bar{6})$) markiert. Diese liegen in diffusen Ebenen (hkl_0) mit $l_0 = \bar{3}, \ldots, \overline{11}$. Lediglich in Abb. A 1a (Gesamtchemismus An_{52}) sind diese diffusen Ebenen aufgrund des geringen Volumens der anorthitreichen Phase schwer zu erkennen. Die c-Reflexe sind häufig durch gewellte diffuse Streuung parallel der reziproken Richtung $(\bar{1}10)$ miteinander verbunden (siehe z. B. Reflexe $(35\overline{11})$-$(44\overline{11})$). Neue Untersuchungen von Adlhart et al. /1/ zeigen diesen gewellten Verlauf auch beim reinen Anorthit oberhalb des Phasenübergangs ($T_C = 241 \pm 4^{\circ}C$) und bei Plagioklasen mit geringen Albit-Beimengungen /2/, wobei hier jedoch kein definierter Phasenübergangspunkt mehr angegeben werden kann.

Bemerkenswert ist eine weitere diffuse Streuung, die bei allen untersuchten Chemismen parallel der reziproken Richtung $(10\bar{1})$ läuft (Reflexe $(0\bar{4}0)$-$(2\bar{4}\bar{2})$).

Im gesamten Mischungsbereich sind an einigen b- bzw. e-Reflexen (siehe Reflex $(3\bar{6}\bar{5})$) diffuse Fächer zu beobachten. Dieser Effekt, der offenbar mit dem Albit-Gehalt zusammenhängt, könnte seinen Ursprung in den Grenzflächen haben /21,22/.

Die Satelliten sind häufig durch diffuse Streuung miteinander verbunden (siehe a- und f-Reflex $(\bar{4}4\bar{4})$ der Abbildungen A 1a - c). Diese Diffusität, die vom Ordnungsgrad der Überstruktur abhängt, weist darauf hin, daß eine strenge Periodizität der Lamellen nicht erfüllt ist.

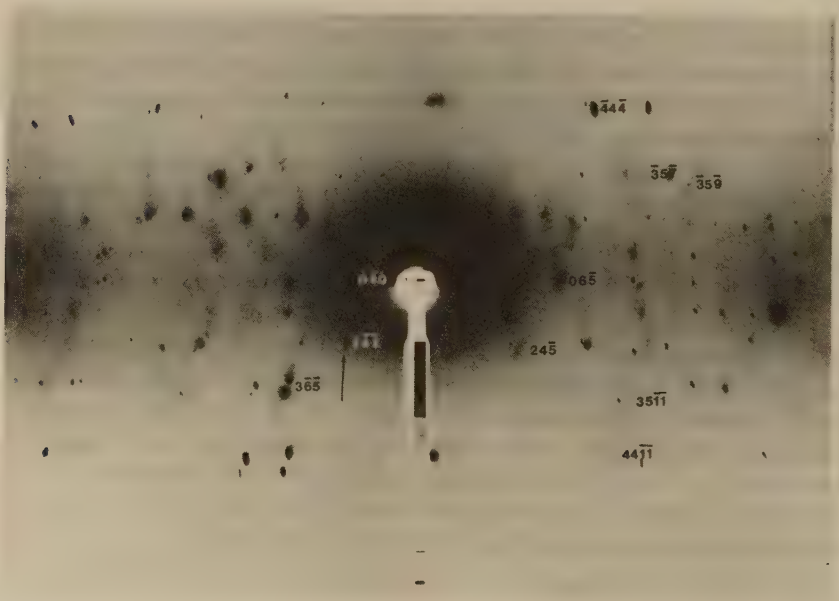

Abb. A 1a: Noromosic-Aufnahme der Probe An_{52}

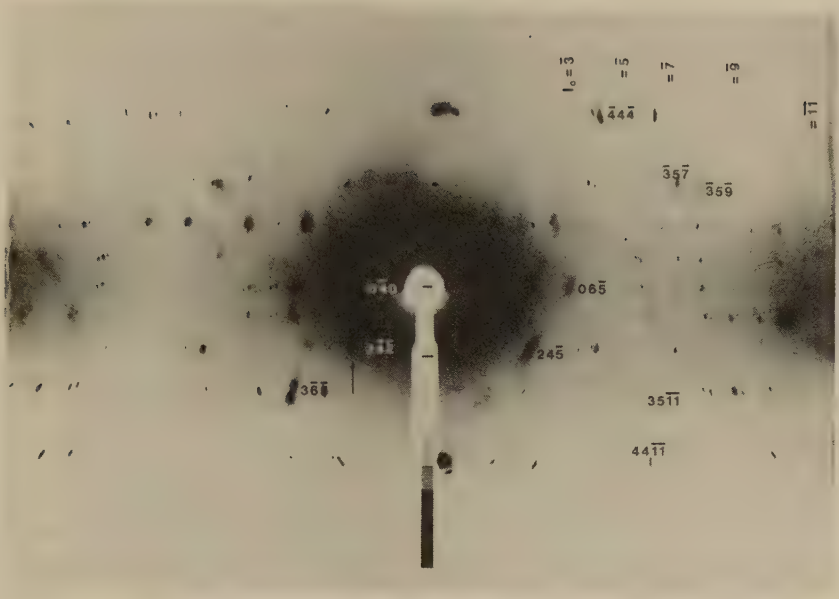

Abb. A 1b: Noromosic-Aufnahme der Probe $An_{58.5}$

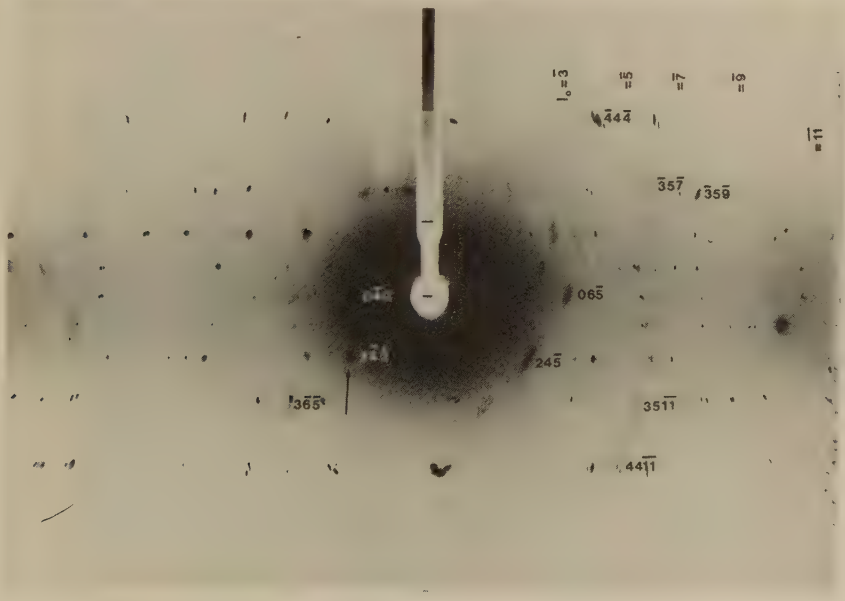

Abb. A 1c: Noromosic-Aufnahme der Probe $An_{69.7}$

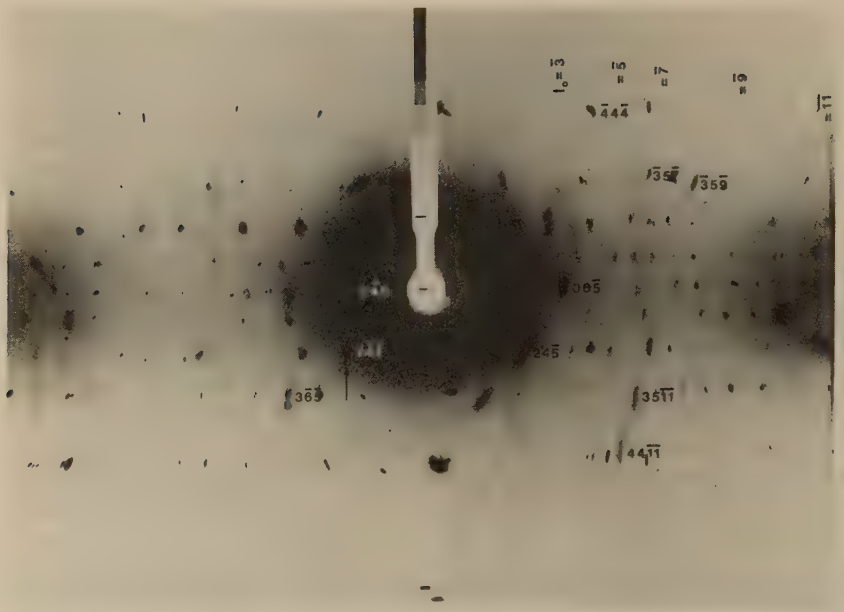

Abb. A 1d: Noromosic-Aufnahme der Probe An_{70}

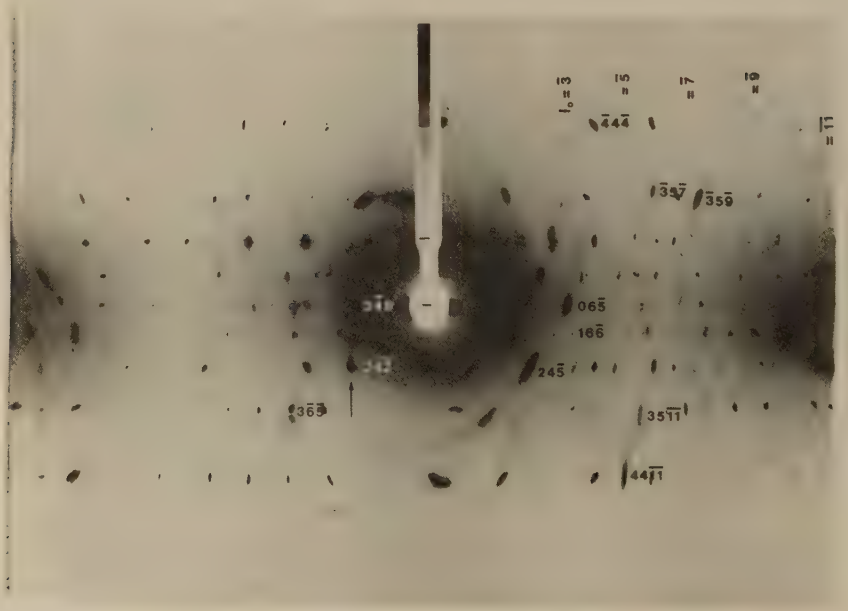

Abb. A 1e: Noromosic-Aufnahme der Probe An_{75}

A 2: Simulierte Weissenberg-Aufnahmen

Die Abbildungen A 2a - e zeigen simulierte Weissenberg-Aufnahmen der zweiten Schicht (2kl) von Kristallen unterschiedlichen Gesamtchemismus. Zwischen den einzelnen aneinandergeklebten Streifen wurde der Azimutwinkel der Kristalle um jeweils 2 Grad gedreht, so daß insgesamt ein Bereich von 25 Grad Rotation durch das reziproke Gitter abgebildet wurde.

Die mit Punkten versehenen Stellen entsprechen den Reflexen mit $h + k + l = 2n$ (a-, b-Reflexe), während die Kreuze Reflexe mit $h + k + l = 2n + 1$ (c-, d-Reflexe) markieren.

In Analogie zu den Abbildungen A 1a - e ist kaum eine Änderung der diffusen Streuung im gesamten untersuchten Bereich zu erkennen. Überwiegend erstreckt sie sich parallel der reziproken Richtung (010) (siehe z. B. die Reflexfolge $(25\bar{5})$-$(24\bar{5})$). Bei höheren Gesamtchemismen (Abb. A 2e) ist diese Richtung nicht nur bei c-, sondern auch bei d-Reflexen zu erkennen. Man beachte jedoch auch die verschiedene Richtung der diffusen Streuung in der Nähe des Reflexes $(2\bar{4}\bar{2})$.

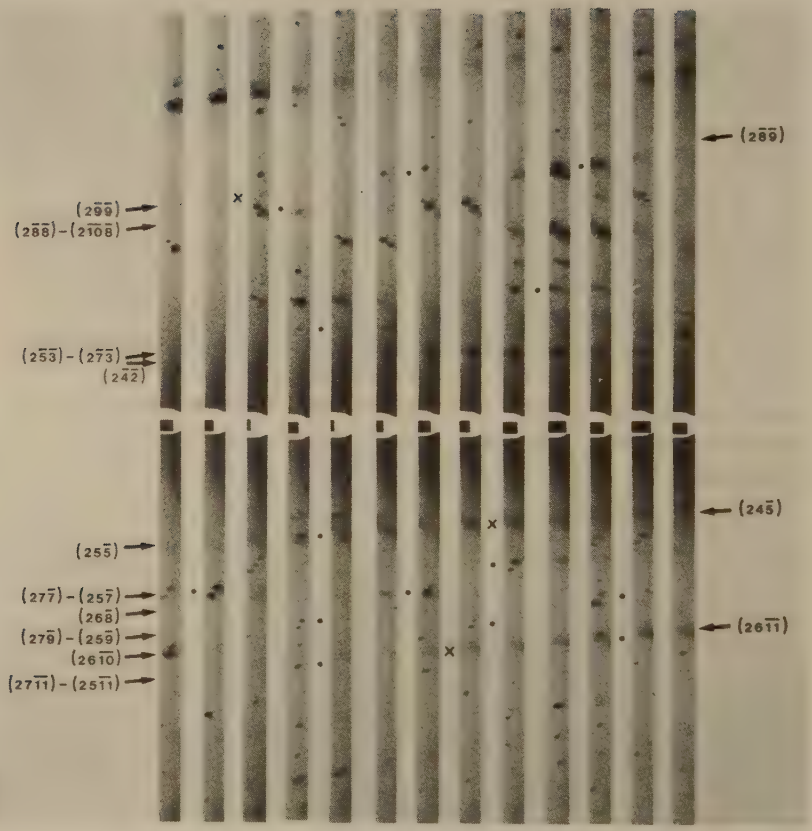

Abb. A 2a: Simulierte Weissenberg-Aufnahme (2kl) der Probe An_{52}

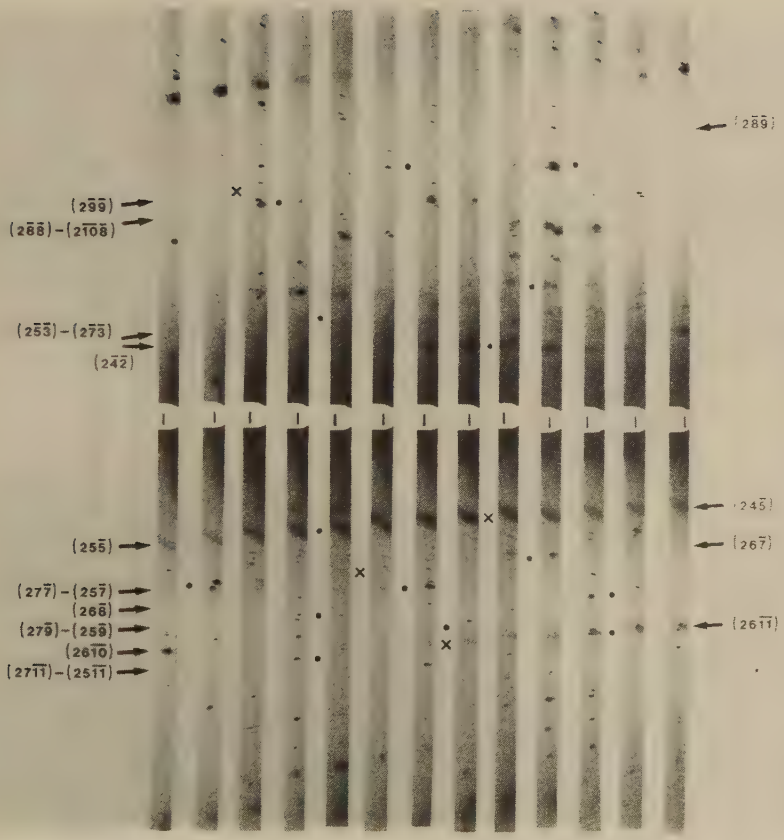

Abb. A 2b: Simulierte Weissenberg-Aufnahme (2k1) der Probe $An_{58.5}$

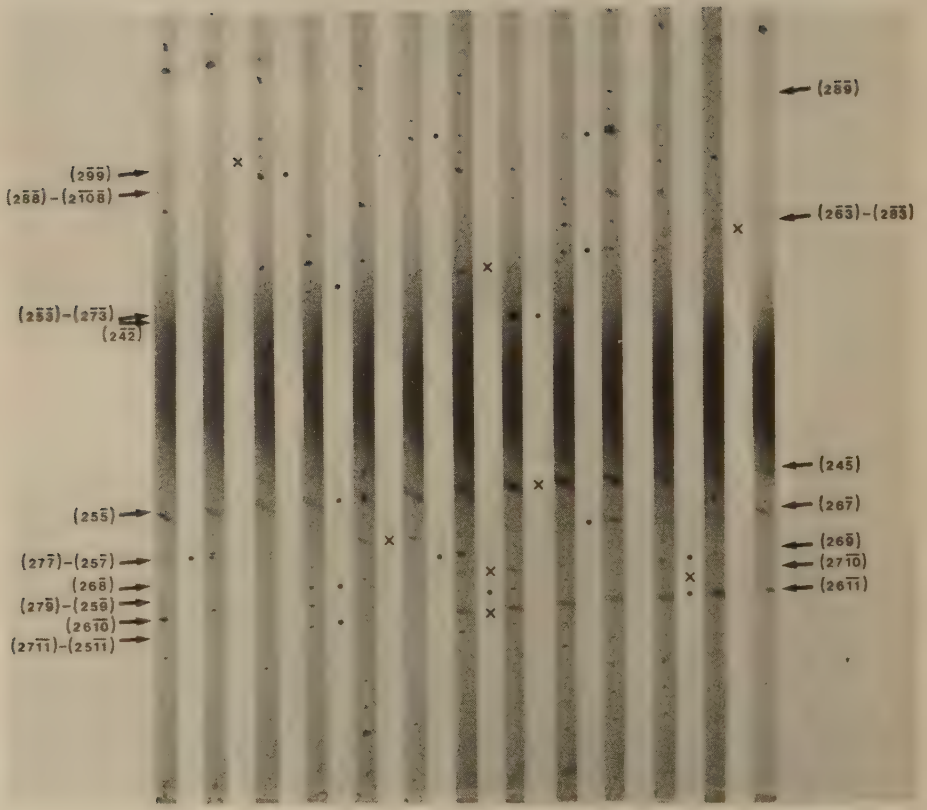

Abb. A 2c: Simulierte Weissenberg-Aufnahme (2kl) der Probe $An_{69.7}$

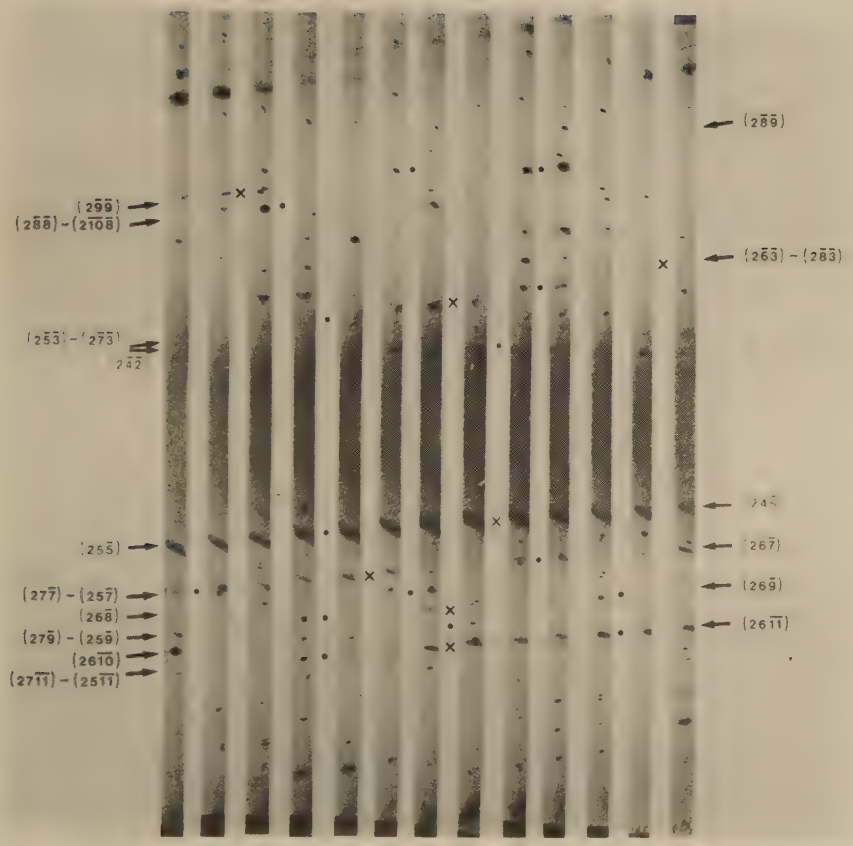

Abb. A 2d: Simulierte Weissenberg-Aufnahme (2kl) der Probe An_{70}

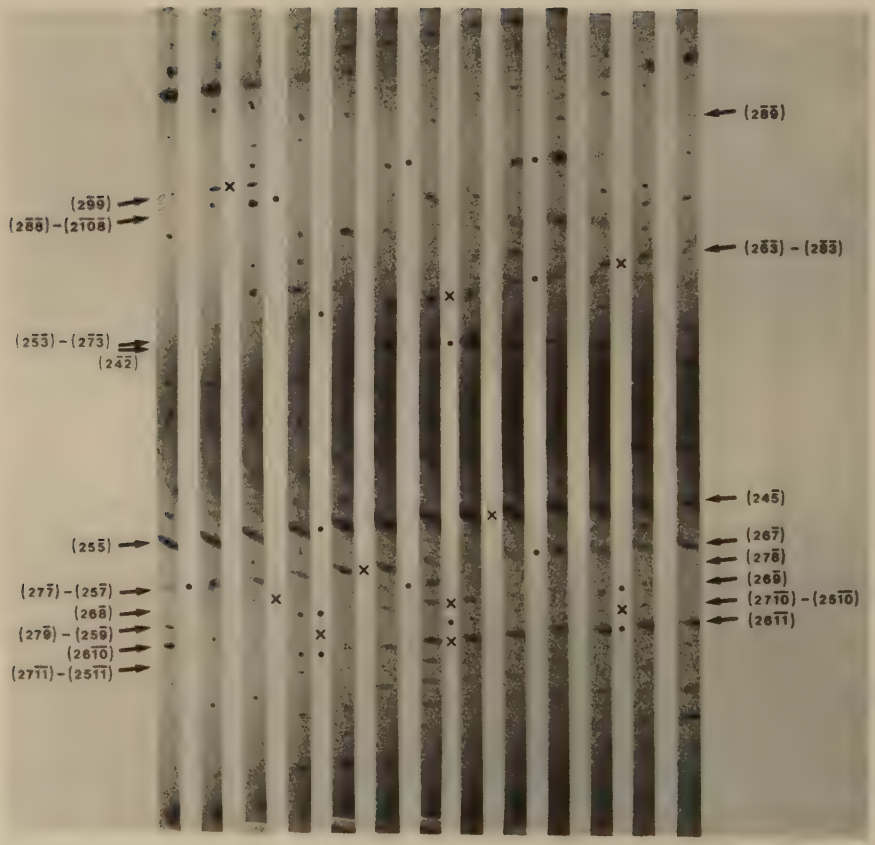

Abb. A 2e: Simulierte Weissenberg-Aufnahme (2kl) der Probe An_{75}

Anhang B Strukturdaten der Probe An_{52}

Tabelle B 1:

Strukturparameter mit Standardabweichungen für An_{52}.
Die T-Atome mit Platzbesetzungszahl K = 0.38(0.62) entsprechen Al(Si)-Atomen.

ATOM	X/A	Y/B	Z/C	K	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Ca	.2688(3)	.0250(2)	.0537(2)	.52	.0158(10)	.0486(15)	.0327(13)	-.0184(11)	.0020(9)	.0041(10)
Na	.2700(5)	.9699(3)	.0880(3)	.48	.0097(17)	.0339(24)	.0149(20)	-.0061(17)	.0069(15)	-.0086(17)
T_1(O)	.0063(1)	.1649(1)	.1070(1)	.38	.0136(6)	.0253(7)	.0097(6)	.0016(5)	.0042(5)	-.0052(5)
T_1(O)	.0063(1)	.1649(1)	.1070(1)	.62	.0136(6)	.0253(7)	.0097(6)	.0016(5)	.0042(5)	-.0052(5)
T_1(m)	.0032(1)	.8175(1)	.1160(1)	.38	.0121(6)	.0233(6)	.0080(5)	-.0001(5)	.0034(5)	.0044(5)
T_1(m)	.0032(1)	.8175(1)	.1160(1)	.62	.0121(6)	.0233(6)	.0080(5)	-.0001(5)	.0034(5)	.0044(5)
T_2(O)	.6863(1)	.1094(1)	.1586(1)	.38	.0112(5)	.0163(6)	.0100(6)	-.0014(4)	.0026(4)	.0002(4)
T_2(O)	.6863(1)	.1094(1)	.1586(1)	.62	.0112(5)	.0163(6)	.0100(6)	-.0014(4)	.0026(4)	.0002(4)
T_2(m)	.6822(1)	.8796(1)	.1785(1)	.38	.0116(5)	.0185(6)	.0097(5)	.0012(4)	.0031(4)	-.0018(4)
T_2(m)	.6822(1)	.8796(1)	.1785(1)	.62	.0116(5)	.0185(6)	.0097(5)	.0012(4)	.0031(4)	-.0018(4)
O_A(1)	.0029(4)	.1296(2)	.9892(2)	1.00	.0264(16)	.0428(19)	.0119(15)	.0041(13)	.0086(13)	.0002(14)
O_A(2)	.5844(3)	.9931(2)	.1397(2)	1.00	.0145(14)	.0251(16)	.0121(14)	.0006(12)	.0039(11)	-.0038(12)
O_B(O)	.8126(3)	.1067(2)	.0955(2)	1.00	.0201(15)	.0239(16)	.0239(16)	-.0016(13)	.0102(13)	-.0040(12)
O_B(m)	.8175(4)	.8532(2)	.1236(2)	1.00	.0230(16)	.0284(17)	.0379(19)	-.0039(14)	.0154(15)	-.0009(13)
O_C(O)	.0152(3)	.2921(2)	.1392(2)	1.00	.0189(15)	.0362(18)	.0176(15)	.0047(13)	.0060(13)	-.0055(13)
O_C(m)	.0173(4)	.6897(2)	.1090(2)	1.00	.0216(16)	.0398(19)	.0151(15)	-.0083(13)	.0008(13)	.0093(14)
O_D(O)	.1983(4)	.1083(2)	.1924(2)	1.00	.0241(16)	.0297(17)	.0130(15)	.0012(12)	.0028(13)	-.0027(13)
O_D(m)	.1884(3)	.8667(2)	.2157(2)	1.00	.0224(16)	.0329(18)	.0161(15)	-.0028(13)	.0003(13)	.0003(13)

Tabelle B 2:

T-O-Bindungslängen mit Standardabweichung für An_{52}

Atome	Längen [Å]	Atome	Längen [Å]
$T_1(O) - O_A(1)$	1.697(2)	$T_1(m) - O_A(1c)$	1.661(2)
$- O_B(O)$	1.691(2)	$- O_B(m)$	1.631(2)
$- O_C(O)$	1.664(2)	$- O_C(m)$	1.647(2)
$- O_D(O)$	1.699(2)	$- O_D(m)$	1.642(2)
Mittelwert:	1.688	Mittelwert:	1.645
$T_2(O) - O_A(2)$	1.662(2)	$T_2(m) - O_A(2)$	1.667(2)
$- O_B(O)$	1.640(2)	$- O_B(m)$	1.636(2)
$- O_C(mzi)$	1.640 +)	$- O_C(Ozi)$	1.643 +)
$- O_D(mzc)$	1.629 +)	$- O_D(Ozc)$	1.652 +)
Mittelwert:	1.643	Mittelwert:	1.650

Aus programmtechnischen Gründen konnten für die mit +) bezeichneten Atomabstände keine Standardabweichungen ermittelt werden. Sie dürften jedoch in der gleichen Größenordnung wie die anderen Werte liegen.

Tabelle B 3:

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR AN52 MO A-REFLEXE

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
2	0	0	154	-184	2	4	0	1096	1051	6	8	0	61	35	1	15	0	425	-396	5	-9	2	461	444
4	0	0	2604	2575	4	4	0	11	-23	-7	9	0	90	-98	-1	-15	2	208	146	-6	-8	2	226	-245
6	0	0	2039	2033	6	4	0	1813	-1822	-5	9	0	815	-809	1	-15	2	541	467	-4	-8	2	211	203
8	0	0	84	-37	8	4	0	823	807	-3	9	0	208	-166	-2	-14	2	52	26	-2	-8	2	1826	1891
-7	1	0	859	844	-7	5	0	303	275	-1	9	0	692	-726	0	-14	2	525	481	0	-8	2	1005	-1042
-5	1	0	289	293	-5	5	0	724	748	1	9	0	1601	-1651	2	-14	2	109	101	2	-8	2	945	971
-3	1	0	947	939	-3	5	0	115	-123	3	9	0	112	-127	-3	-13	2	157	163	4	-8	2	864	879
-1	1	0	447	422	-1	5	0	533	-490	5	9	0	849	-825	-1	-13	2	116	102	6	-8	2	411	-379
1	1	0	169	136	1	5	0	348	-324	-6	10	0	116	92	1	-13	2	440	-401	-7	-7	2	80	-71
3	1	0	874	883	3	5	0	126	-121	-4	10	0	239	217	3	-13	2	244	229	-5	-7	2	186	202
5	1	0	238	235	5	5	0	354	371	-2	10	0	451	-447	-4	-12	2	39	-10	-3	-7	2	434	450
7	1	0	731	739	7	5	0	734	711	0	10	0	883	878	-2	-12	2	919	-901	-1	-7	2	714	-747
-8	2	0	458	-422	-8	6	0	965	926	2	10	0	153	159	0	-12	2	594	561	1	-7	2	716	745
-6	2	0	1073	-1082	-6	6	0	195	195	4	10	0	168	-151	2	-12	2	841	-814	3	-7	2	57	-4
-4	2	0	603	-587	-4	6	0	1021	1029	6	10	0	406	375	4	-12	2	425	-388	5	-7	2	484	-494
-2	2	0	2578	-2515	-2	6	0	1508	1557	-5	11	0	490	483	-5	-11	2	321	-317	7	-7	2	83	61
0	2	0	149	-58	0	6	0	1600	1642	-3	11	0	338	355	-3	-11	2	548	-568	-8	-6	2	90	72
2	2	0	2528	-2389	2	6	0	1499	1507	-1	11	0	183	193	-1	-11	2	148	-139	-6	-6	2	99	-69
4	2	0	843	-830	4	6	0	1392	1386	1	11	0	259	282	1	-11	2	176	-186	-4	-6	2	679	646
6	2	0	1321	-1327	6	6	0	355	346	3	11	0	276	300	3	-11	2	459	-469	-2	-6	2	379	-393
8	2	0	467	-450	-7	7	0	439	421	5	11	0	329	318	5	-11	2	43	-9	0	-6	2	92	86
-7	3	0	359	-401	-5	7	0	479	477	-4	12	0	45	-25	-6	-10	2	50	15	2	-6	2	580	-570
-5	3	0	806	-799	-3	7	0	467	483	-2	12	0	877	833	-4	-10	2	301	-293	4	-6	2	530	-542
-3	3	0	486	-534	-1	7	0	1028	1053	0	12	0	396	-403	-2	-10	2	329	343	6	-6	2	57	-32
-1	3	0	1835	-1834	1	7	0	231	229	2	12	0	839	805	0	-10	2	621	-620	-7	-5	2	548	530
1	3	0	1727	-1725	3	7	0	779	789	4	12	0	317	279	2	-10	2	402	-406	-5	-5	2	864	-878
3	3	0	614	-627	5	7	0	520	541	-3	13	0	481	-453	4	-10	2	170	185	-3	-5	2	727	-714
5	3	0	1039	-1034	7	7	0	388	391	-1	13	0	63	32	6	-10	2	462	-421	-1	-5	2	963	984
7	3	0	146	-146	-6	8	0	182	-137	1	13	0	398	365	-7	-9	2	470	-428	1	-5	2	975	-994
-8	4	0	772	764	-4	8	0	505	-528	3	13	0	533	-505	-5	-9	2	394	404	3	-5	2	972	966
-6	4	0	1810	-1822	-2	8	0	1924	-1983	-2	14	0	354	321	-3	-9	2	112	73	5	-5	2	52	20
-4	4	0	261	-259	0	8	0	1068	1091	0	14	0	865	-794	-1	-9	2	353	-354	7	-5	2	423	-401
-2	4	0	815	797	2	8	0	1722	-1747	2	14	0	113	45	1	-9	2	1543	1591	-8	-4	2	663	-651
0	4	0	2655	-2723	4	8	0	897	-903	-1	15	0	178	-139	3	-9	2	32	3	-6	-4	2	100	52

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-4	-4	2	1028	1013	-4	0	2	1273	1235	-8	4	2	322	-326	-2	8	2	325	326	-2	14	2	592	-556
-2	-4	2	2231	-2336	-2	0	2	2389	2375	-6	4	2	1124	-1123	0	8	2	280	-247	0	14	2	440	-378
0	-4	2	1864	1890	0	0	2	216	-117	-4	4	2	1243	1239	2	8	2	1232	-1226	2	14	2	125	81
2	-4	2	2000	-1961	2	0	2	99	-70	-2	4	2	1891	-1966	4	8	2	439	446	-1	15	2	296	-204
4	-4	2	765	-764	4	0	2	854	860	0	4	2	305	308	6	8	2	624	-553	-1	-15	4	633	576
6	-4	2	771	761	6	0	2	911	-910	2	4	2	629	-605	-7	9	2	986	-939	-2	-14	4	662	598
-7	-3	2	399	427	8	0	2	345	336	4	4	2	1390	-1381	-5	9	2	216	210	0	-14	4	392	403
-5	-3	2	873	-857	-9	1	2	449	446	6	4	2	604	578	-3	9	2	1051	-1031	2	-14	4	102	51
-3	-3	2	1552	-1490	-7	1	2	429	-431	-7	5	2	633	612	-1	9	2	904	-944	-5	-13	4	107	87
-1	-3	2	1095	1087	-5	1	2	1044	1052	-5	5	2	811	-825	1	9	2	299	319	-3	-13	4	542	527
1	-3	2	1856	-1809	-3	1	2	331	-343	-3	5	2	644	-660	3	9	2	559	-567	-1	-13	4	736	-674
3	-3	2	746	749	-1	1	2	222	-143	-1	5	2	762	825	5	9	2	282	-279	1	-13	4	730	685
5	-3	2	183	-195	1	1	2	1646	1491	1	5	2	1601	-1602	-6	10	2	290	244	3	-13	4	258	-199
7	-3	2	329	-362	3	1	2	914	882	3	5	2	1588	1594	-4	10	2	567	-542	-4	-12	4	967	-903
-8	-2	2	185	-204	5	1	2	466	-451	5	5	2	38	9	-2	10	2	907	908	-2	-12	4	144	-140
-6	-2	2	713	-728	7	1	2	1009	1004	7	5	2	183	-183	0	10	2	99	-106	0	-12	4	554	-505
-4	-2	2	570	564	-8	2	2	236	223	-8	6	2	430	402	2	10	2	416	-417	2	-12	4	774	-747
-2	-2	2	718	-746	-6	2	2	741	-748	-6	6	2	130	148	4	10	2	364	336	4	-12	4	236	215
0	-2	2	528	550	-4	2	2	157	159	-4	6	2	1900	1930	-5	11	2	232	224	-5	-11	4	686	-694
2	-2	2	861	-859	-2	2	2	188	-215	-2	6	2	36	23	-3	11	2	167	200	-3	-11	4	263	-273
4	-2	2	387	407	0	2	2	32	24	0	6	2	1229	1234	-1	11	2	56	17	-1	-11	4	1256	-1251
6	-2	2	72	77	2	2	2	913	-902	2	6	2	463	461	1	11	2	305	314	1	-11	4	208	-217
8	-2	2	269	279	4	2	2	38	37	4	6	2	227	-217	3	11	2	414	432	3	-11	4	866	-842
-9	-1	2	336	341	6	2	2	45	4	6	6	2	522	500	5	11	2	187	167	-6	-10	4	319	-300
-7	-1	2	338	-340	8	2	2	60	91	-7	7	2	213	213	-4	12	2	855	800	-4	-10	4	66	-15
-5	-1	2	744	752	-9	3	2	334	-295	-5	7	2	829	854	-2	12	2	180	154	-2	-10	4	879	-884
-3	-1	2	282	-277	-7	3	2	122	142	-3	7	2	90	-90	0	12	2	54	17	0	-10	4	335	-323
-1	-1	2	272	-221	-5	3	2	793	-783	-1	7	2	656	664	2	12	2	880	846	2	-10	4	88	-43
1	-1	2	1203	1107	-3	3	2	1188	-1223	1	7	2	474	472	4	12	2	539	-516	4	-10	4	299	-286
3	-1	2	887	866	-1	3	2	376	400	3	7	2	517	501	-5	13	2	150	-132	-7	-9	4	1044	1028
5	-1	2	560	-548	1	3	2	1970	-1923	5	7	2	79	-23	-3	13	2	125	86	-5	-9	4	408	413
7	-1	2	815	796	3	3	2	770	766	7	7	2	236	224	-1	13	2	358	327	-3	-9	4	799	825
-8	0	2	1359	1316	5	3	2	674	-687	-6	8	2	75	-83	1	13	2	354	-367	-1	-9	4	1902	1967
-6	0	2	192	175	7	3	2	294	-325	-4	8	2	1046	-1080	3	13	2	340	326	1	-9	4	484	490

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR AN52 MO A=REFLEXE

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
5	-9	4	661	644	-6	-4	4	991	999	-6	0	4	2605	-2571	-6	4	4	1434	1477	0	8	4	54	-12
5	-9	4	968	941	-4	-4	4	1720	-1797	-4	0	4	953	964	-4	4	4	1275	-1303	2	8	4	2207	2236
-8	-8	4	795	780	-2	-4	4	227	-224	-2	0	4	3448	-3314	-2	4	4	776	775	4	8	4	234	-230
-6	-8	4	312	325	0	-4	4	193	-163	0	0	4	3760	-3535	0	4	4	726	721	-7	9	4	140	120
-4	-8	4	1978	2035	2	-4	4	1728	-1721	2	0	4	644	616	2	4	4	1475	-1473	-5	9	4	775	775
-2	-8	4	332	337	4	-4	4	1149	1154	4	0	4	2695	-2691	4	4	4	1289	1309	-3	9	4	187	-171
0	-8	4	1029	1028	6	-4	4	137	-141	6	0	4	147	-168	6	4	4	366	355	-1	9	4	1205	1235
2	-8	4	1691	1711	-9	-3	4	698	688	-9	1	4	331	-312	-9	5	4	230	224	1	9	4	794	800
4	-8	4	390	368	-7	-3	4	266	-251	-7	1	4	363	-376	-7	5	4	892	-897	3	9	4	207	207
6	-8	4	894	841	-5	-3	4	845	877	-5	1	4	318	310	-5	5	4	261	-272	5	9	4	765	741
-7	-7	4	195	179	-3	-3	4	340	384	-3	1	4	546	-588	-3	5	4	593	-599	-6	10	4	575	-544
-5	-7	4	449	-482	-1	-3	4	1100	1082	-1	1	4	1741	1689	-1	5	4	707	671	-4	10	4	591	581
-3	-7	4	322	-334	1	-3	4	629	640	1	1	4	218	-266	1	5	4	886	-879	-2	10	4	192	-196
-1	-7	4	548	556	3	-3	4	841	845	3	1	4	195	201	3	5	4	516	495	0	10	4	931	-932
1	-7	4	750	-750	5	-3	4	175	-164	5	1	4	216	-239	5	5	4	1144	-1144	2	10	4	711	691
3	-7	4	158	-170	7	-3	4	926	922	7	1	4	397	-368	-8	6	4	500	-505	4	10	4	590	-571
5	-7	4	109	-82	-8	-2	4	855	831	-8	2	4	901	880	-6	6	4	72	58	-5	11	4	299	-297
-8	-6	4	340	-327	-6	-2	4	1192	1201	-6	2	4	184	-165	-4	6	4	1657	-1719	-3	11	4	495	-498
-6	-6	4	601	-598	-4	-2	4	1081	1120	-4	2	4	1951	2064	-2	6	4	1012	-1018	-1	11	4	169	166
-4	-6	4	831	-870	-2	-2	4	1355	1278	-2	2	4	321	301	0	6	4	1238	-1222	1	11	4	364	-386
-2	-6	4	1130	-1158	0	-2	4	1619	1575	0	2	4	185	174	2	6	4	1880	-1877	3	11	4	186	-205
0	-6	4	1237	-1236	2	-2	4	1154	1135	2	2	4	1982	1964	4	6	4	538	-529	-4	12	4	798	-770
2	-6	4	1088	-1086	4	-2	4	1071	1091	4	2	4	142	152	6	6	4	377	-358	-2	12	4	76	-70
4	-6	4	365	-354	6	-2	4	971	970	6	2	4	997	985	-7	7	4	530	-537	0	12	4	222	-196
6	-6	4	688	-678	-9	-1	4	222	-199	-9	3	4	482	503	-5	7	4	134	125	2	12	4	934	-909
-7	-5	4	1086	-1089	-7	-1	4	369	-371	-7	3	4	135	-105	-3	7	4	462	-475	-5	13	4	388	-354
-5	-5	4	285	-304	-5	-1	4	89	-87	-5	3	4	729	785	-1	7	4	77	58	-3	13	4	368	356
-3	-5	4	86	-99	-3	-1	4	941	-940	-3	3	4	524	-521	1	7	4	211	-216	-1	13	4	416	-354
-1	-5	4	572	-635	-1	-1	4	1271	1223	-1	3	4	1686	1677	3	7	4	149	-165	1	13	4	122	-141
1	-5	4	88	-86	1	-1	4	892	-905	1	3	4	444	-432	5	7	4	451	-470	-2	14	4	257	237
3	-5	4	299	-331	3	-1	4	160	-160	3	3	4	1059	1077	-8	8	4	773	713	0	14	4	565	529
5	-5	4	1298	-1278	5	-1	4	349	-352	5	3	4	230	-252	-6	8	4	227	-222	-2	-14	6	104	-106
7	-5	4	216	201	7	-1	4	447	-424	7	3	4	573	572	-4	8	4	1875	1901	0	-14	6	51	12
-8	-4	4	129	-128	-8	0	4	129	115	-8	4	4	54	40	-2	8	4	472	489	-5	-13	6	312	293

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-3	-13	6	417	-406	-5	-7	6	472	-511	-1	-3	6	255	-208	3	1	6	1066	1102	-8	6	6	162	-186
-1	-13	6	312	315	-3	-7	6	785	824	1	-3	6	918	929	5	1	6	782	-790	-6	6	6	1351	-1381
1	-13	6	63	21	-1	-7	6	481	459	3	-3	6	989	-1004	-8	2	6	115	-68	-4	6	6	1397	-1418
-6	-12	6	951	-918	1	-7	6	564	-550	5	-3	6	520	531	-6	2	6	1022	1088	-2	6	6	450	-448
-4	-12	6	453	475	3	-7	6	928	951	-8	-2	6	728	735	-4	2	6	619	-602	0	6	6	2114	-2106
-2	-12	6	247	-262	5	-7	6	107	-66	-6	-2	6	127	-88	-2	2	6	943	918	2	6	6	388	401
0	-12	6	406	-378	-8	-6	6	171	-152	-4	-2	6	652	639	0	2	6	573	563	4	6	6	823	-815
2	-12	6	556	518	-6	-6	6	71	-29	-2	-2	6	44	56	2	2	6	602	603	-7	7	6	581	-591
-5	-11	6	104	119	-4	-6	6	607	-632	0	-2	6	156	-148	4	2	6	81	84	-5	7	6	24	-8
-3	-11	6	147	-135	-2	-6	6	73	67	2	-2	6	1018	1021	6	2	6	492	462	-3	7	6	434	-441
-1	-11	6	256	-237	0	-6	6	234	230	4	-2	6	426	-463	-9	3	6	523	486	-1	7	6	43	5
1	-11	6	104	85	2	-6	6	77	-78	6	-2	6	117	90	-7	3	6	182	-207	1	7	6	545	-558
3	-11	6	256	-226	4	-6	6	207	218	-9	-1	6	98	72	-5	3	6	1406	1450	3	7	6	213	-205
-6	-10	6	136	-146	6	-6	6	146	-139	-7	-1	6	306	-297	-3	3	6	96	-88	5	7	6	74	-39
-4	-10	6	77	73	-9	-5	6	413	-391	-5	-1	6	61	-77	-1	3	6	874	902	-8	8	6	253	256
-2	-10	6	259	-267	-7	-5	6	342	-330	-3	-1	6	190	163	1	3	6	394	387	-6	8	6	981	1000
0	-10	6	464	467	-5	-5	6	519	547	-1	-1	6	383	373	3	3	6	56	61	-4	8	6	398	414
2	-10	6	99	-78	-3	-5	6	849	-856	1	-1	6	1169	-1147	5	3	6	563	574	-2	8	6	728	736
4	-10	6	154	135	-1	-5	6	195	-201	3	-1	6	578	594	-8	4	6	771	781	0	8	6	946	962
-7	-9	6	408	386	1	-5	6	317	-313	5	-1	6	388	-379	-6	4	6	206	-186	2	8	6	751	725
-5	-9	6	249	-252	3	-5	6	1049	-1072	-8	0	6	1077	-1048	-4	4	6	235	234	4	8	6	289	290
-3	-9	6	973	999	5	-5	6	212	204	-6	0	6	618	623	-2	4	6	618	642	-7	9	6	670	663
-1	-9	6	490	-506	-8	-4	6	618	565	-4	0	6	2402	-2335	0	4	6	1096	-1113	-5	9	6	173	148
1	-9	6	489	-494	-6	-4	6	1489	-1544	-2	0	6	43	-53	2	4	6	1678	1713	-3	9	6	1460	1492
3	-9	6	426	434	-4	-4	6	709	693	0	0	6	426	414	4	4	6	490	-527	-1	9	6	904	900
5	-9	6	772	-746	-2	-4	6	574	-537	2	0	6	731	-745	6	4	6	104	79	1	9	6	113	-109
-8	-8	6	404	-347	0	-4	6	1097	-1090	4	0	6	122	150	-9	5	6	157	-122	3	9	6	1213	1223
-6	-8	6	1023	1047	2	-4	6	1635	1643	6	0	6	358	374	-7	5	6	1061	-1105	-6	10	6	605	588
-4	-8	6	792	-820	4	-4	6	646	-651	-9	1	6	227	214	-5	5	6	1402	1470	-4	10	6	142	-141
-2	-8	6	81	52	6	-4	6	102	-126	-7	1	6	108	121	-3	5	6	1561	-1592	-2	10	6	443	-441
0	-8	6	1301	1317	-9	-3	6	222	177	-5	1	6	652	-674	-1	5	6	213	-204	0	10	6	590	575
2	-8	6	960	-976	-7	-3	6	429	-443	-3	1	6	841	791	1	5	6	234	232	2	10	6	68	6
4	-8	6	648	624	-5	-3	6	1830	1874	-1	1	6	1071	1037	3	5	6	1729	-1759	-5	11	6	311	-324
-7	-7	6	437	432	-3	-3	6	542	-533	1	1	6	2190	-2203	5	5	6	225	225	-3	11	6	146	-152

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR AN5Z MO A=REFLEXE

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-1	11	6	308	-322	-2	-8	8	137	-127	-5	-3	8	1821	-1843	3	1	8	410	-428	-2	6	8	331	331
1	11	6	542	-540	0	-8	8	1034	-1019	-3	-3	8	890	-878	5	1	8	555	580	0	6	8	998	994
3	11	6	360	-367	2	-8	8	629	-607	-1	-3	8	724	-736	-8	2	8	51	-35	2	6	8	1225	1228
-4	12	6	906	-853	4	-8	8	351	-332	1	-3	8	2277	-2326	-6	2	8	106	120	4	6	8	264	-280
-2	12	6	311	-285	-7	-7	8	325	-321	3	-3	8	143	155	-4	2	8	1333	-1323	-7	7	8	204	218
0	12	6	863	-818	-5	-7	8	1238	1282	5	-3	8	666	-699	-2	2	8	1490	1477	-5	7	8	111	88
2	12	6	283	-254	-3	-7	8	216	-227	-8	-2	8	1105	-1112	0	2	8	1003	-1018	-3	7	8	115	131
-3	13	6	536	-502	-1	-7	8	71	-52	-6	-2	8	967	-972	2	2	8	73	-84	-1	7	8	83	73
-1	13	6	240	-212	1	-7	8	1260	1285	-4	-2	8	1175	-1168	4	2	8	238	-245	1	7	8	194	203
1	13	6	177	184	3	-7	8	197	-200	-2	-2	8	1313	-1314	-9	3	8	131	104	3	7	8	162	172
-3	-13	8	139	77	-8	-6	8	427	425	0	-2	8	1336	-1334	-7	3	8	359	-375	-8	8	8	188	-163
-1	-13	8	95	-42	-6	-6	8	412	423	2	-2	8	879	-917	-5	3	8	85	-86	-6	8	8	161	159
-4	-12	8	475	455	-4	-6	8	1004	1004	4	-2	8	1231	-1262	-3	3	8	485	-484	-4	8	8	1196	-1213
-2	-12	8	161	-149	-2	-6	8	812	798	-9	-1	8	302	289	-1	3	8	666	-661	-2	8	8	928	915
0	-12	8	833	771	0	-6	8	1135	1143	-7	-1	8	71	70	1	3	8	341	-361	0	8	8	922	-908
2	-12	8	93	-69	2	-6	8	610	600	-5	-1	8	807	794	3	3	8	511	-483	2	8	8	196	-216
-5	-11	8	153	-118	4	-6	8	441	424	-3	-1	8	101	100	5	3	8	83	83	-7	9	8	221	-233
-3	-11	8	757	745	-9	-5	8	363	352	-1	-1	8	58	16	-8	4	8	960	-961	-5	9	8	234	225
-1	-11	8	816	847	-7	-5	8	797	859	1	-1	8	881	904	-6	4	8	353	-376	-3	9	8	278	266
1	-11	8	124	-148	-5	-5	8	62	33	3	-1	8	183	186	-4	4	8	301	-300	-1	9	8	822	-820
-6	-10	8	68	-23	-3	-5	8	424	464	5	-1	8	468	470	-2	4	8	1068	-1059	1	9	8	446	433
-4	-10	8	267	260	-1	-5	8	653	667	-8	0	8	758	769	0	4	8	499	-502	3	9	8	356	-347
-2	-10	8	481	468	1	-5	8	268	-250	-6	0	8	1203	1210	2	4	8	122	-77	-6	10	8	349	331
0	-10	8	148	102	3	-5	8	1082	1088	-4	0	8	191	179	4	4	8	1360	-1384	-4	10	8	895	-864
2	-10	8	65	-32	5	-5	8	303	301	-2	0	8	3523	3464	-9	5	8	112	67	-2	10	8	1289	1254
-7	-9	8	693	-710	-8	-4	8	544	-537	0	0	8	694	692	-7	5	8	412	436	0	10	8	402	-379
-5	-9	8	196	-195	-6	-4	8	65	53	2	0	8	1436	1467	-5	5	8	227	-240	2	10	8	56	-25
-3	-9	8	1293	-1318	-4	-4	8	733	733	4	0	8	1152	1158	-3	5	8	356	-341	-5	11	8	247	238
-1	-9	8	1128	-1113	-2	-4	8	424	-428	-9	1	8	621	647	-1	5	8	104	117	-3	11	8	55	36
1	-9	8	280	-285	0	-4	8	807	821	-7	1	8	370	-372	1	5	8	683	-719	-1	11	8	470	-473
3	-9	8	943	-902	2	-4	8	47	-56	-5	1	8	1392	1398	3	5	8	139	149	1	11	8	258	270
-8	-8	8	61	-60	4	-4	8	642	-651	-3	1	8	107	-106	-8	6	8	578	-545	-4	12	8	153	147
-6	-8	8	994	-1011	-9	-3	8	434	-440	-1	1	8	635	-633	-6	6	8	530	522	-2	12	8	171	-190
-4	-8	8	666	-663	-7	-3	8	227	225	1	1	8	1438	1474	-4	6	8	895	892	0	12	8	302	285

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR AN52 MO A-REFLEXE

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-4	-12	10	259	-273	2	-6	10	464	487	1	-1	10	240	223	0	4	10	1046	-1073	-3	11	10	49	-8
-2	-12	10	481	487	-9	-5	10	575	584	3	-1	10	31	12	2	4	10	836	-837	-1	11	10	283	286
0	-12	10	47	-16	-7	-5	10	100	94	-8	0	10	443	441	-7	5	10	145	-150	-3	-11	12	1360	-1325
-5	-11	10	250	281	-5	-5	10	531	522	-6	0	10	878	861	-5	5	10	911	-910	-4	-10	12	409	-442
-3	-11	10	204	151	-3	-5	10	624	632	-4	0	10	1973	1985	-3	5	10	1540	1542	-2	-10	12	484	-416
-1	-11	10	179	-142	-1	-5	10	255	263	-2	0	10	501	505	-1	5	10	1349	-1361	0	-10	12	191	-209
1	-11	10	356	316	1	-5	10	857	880	0	0	10	764	777	1	5	10	881	877	-5	-9	12	487	493
-6	-10	10	77	-28	3	-5	10	474	471	2	0	10	1059	1063	3	5	10	473	481	-3	-9	12	808	795
-4	-10	10	40	-34	-8	-4	10	233	226	4	0	10	83	-56	-8	6	10	362	371	-1	-9	12	440	409
-2	-10	10	239	-200	-6	-4	10	578	583	-9	1	10	201	-204	-6	6	10	1676	1657	-6	-8	12	917	899
0	-10	10	148	-186	-4	-4	10	880	-852	-7	1	10	877	851	-4	6	10	81	78	-4	-8	12	153	121
2	-10	10	183	-157	-2	-4	10	675	657	-5	1	10	938	916	-2	6	10	1748	1747	-2	-8	12	410	423
-7	-9	10	126	-146	0	-4	10	536	-539	-3	1	10	656	-646	0	6	10	585	555	0	-8	12	847	788
-5	-9	10	501	-481	2	-4	10	712	-745	-1	1	10	1796	1839	2	6	10	173	150	-7	-7	12	143	-143
-3	-9	10	724	-737	4	-4	10	272	263	1	1	10	753	771	-7	7	10	331	335	-5	-7	12	482	-481
-1	-9	10	624	634	-9	-3	10	92	61	3	1	10	86	-59	-5	7	10	46	23	-3	-7	12	1154	1143
1	-9	10	574	-566	-7	-3	10	1212	-1171	-8	2	10	481	-471	-3	7	10	879	870	-1	-7	12	460	-478
-8	-8	10	191	-195	-5	-3	10	1443	-1436	-6	2	10	19	-24	-1	7	10	148	-131	1	-7	12	187	-169
-6	-8	10	652	-644	-3	-3	10	40	5	-4	2	10	575	567	1	7	10	881	898	-8	-6	12	74	64
-4	-8	10	846	819	-1	-3	10	1802	-1836	-2	2	10	559	-572	-6	8	10	160	-174	-6	-6	12	119	-92
-2	-8	10	981	-944	1	-3	10	100	-98	0	2	10	292	-296	-4	8	10	387	-374	-4	-6	12	301	-291
0	-8	10	203	-226	3	-3	10	168	-178	2	2	10	116	104	-2	8	10	395	-406	-2	-6	12	226	-192
2	-8	10	195	233	-8	-2	10	543	-573	4	2	10	553	-576	0	8	10	522	-503	0	-6	12	395	-395
-7	-7	10	345	353	-6	-2	10	386	-395	-9	3	10	462	-425	2	8	10	297	-292	2	-6	12	44	3
-5	-7	10	136	147	-4	-2	10	1456	-1451	-7	3	10	469	-431	-7	9	10	48	-50	-7	-5	12	411	-409
-3	-7	10	661	-663	-2	-2	10	66	-83	-5	3	10	977	-974	-5	9	10	321	-292	-5	-5	12	95	-86
-1	-7	10	1092	1083	0	-2	10	1135	-1137	-3	3	10	668	-683	-3	9	10	1230	-1230	-3	-5	12	536	-520
1	-7	10	471	-474	2	-2	10	725	-737	-1	3	10	1031	-1039	-1	9	10	37	-5	-1	-5	12	30	-36
3	-7	10	99	68	4	-2	10	86	-36	1	3	10	211	-212	1	9	10	229	-216	1	-5	12	460	-448
-8	-6	10	385	362	-9	-1	10	142	164	3	3	10	805	-820	-6	10	10	346	-328	-8	-4	12	271	248
-6	-6	10	337	322	-7	-1	10	258	272	-8	4	10	819	-839	-4	10	10	367	365	-6	-4	12	741	-715
-4	-6	10	1137	1135	-5	-1	10	88	-66	-6	4	10	72	-75	-2	10	10	200	-197	-4	-4	12	296	-310
-2	-6	10	150	153	-3	-1	10	78	71	-4	4	10	1550	-1543	0	10	10	380	-344	-2	-4	12	292	-311
0	-6	10	447	448	-1	-1	10	456	442	-2	4	10	45	51	-5	11	10	60	51	0	-4	12	897	-900

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR AN52 MO A=REFLEXE

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
2	-4	12	282	266	-6	2	12	688	649	-2	8	12	142	-139	-4	-2	14	692	714	-7	5	14	650	628
-7	-3	12	15	5	-4	2	12	51	26	0	8	12	519	522	-2	-2	14	153	132	-5	5	14	816	-789
-5	-3	12	1318	1316	-2	2	12	335	-348	-5	9	12	758	-743	0	-2	14	773	790	-3	5	14	204	-184
-3	-3	12	940	-958	0	2	12	532	523	-3	9	12	682	664	-7	-1	14	58	-7	-1	5	14	209	203
-1	-3	12	1354	1385	2	2	12	105	-76	-1	9	12	235	-240	-5	-1	14	88	-86	-6	6	14	837	-840
1	-3	12	521	516	-7	3	12	211	202	-3	-9	14	60	68	-3	-1	14	120	-113	-4	6	14	512	-506
-8	-2	12	595	582	-5	3	12	444	-459	-6	-8	14	184	217	-1	-1	14	227	-217	-2	6	14	1544	-1528
-6	-2	12	274	290	-3	3	12	723	715	-4	-8	14	45	16	1	-1	14	124	-97	-5	7	14	700	-666
-4	-2	12	389	405	-1	3	12	173	-192	-2	-8	14	1105	1088	-8	0	14	194	-194	-3	7	14	152	-141
-2	-2	12	553	543	1	3	12	295	279	-5	-7	14	1065	1007	-6	0	14	844	-842	-5	-5	16	180	155
0	-2	12	278	310	-8	4	12	264	251	-3	-7	14	276	-254	-4	0	14	981	-976	-3	-5	16	155	163
2	-2	12	683	687	-6	4	12	15	28	-1	-7	14	103	71	-2	0	14	189	-194	-6	-4	16	518	501
-9	-1	12	238	-226	-4	4	12	49	34	-6	-6	14	310	-271	0	0	14	732	-698	-4	-4	16	231	-173
-7	-1	12	256	-261	-2	4	12	291	292	-4	-6	14	755	-757	-7	1	14	874	-831	-2	-4	16	510	516
-5	-1	12	203	-200	0	4	12	70	-70	-2	-6	14	211	220	-5	1	14	338	349	-5	-3	16	104	-108
-3	-1	12	188	-151	2	4	12	306	316	0	-6	14	486	-469	-3	1	14	326	-336	-3	-3	16	84	29
-1	-1	12	200	-203	-7	5	12	114	-136	-7	-5	14	452	-426	-1	1	14	1092	-1087	-6	-2	16	44	-33
1	-1	12	237	-261	-5	5	12	152	163	-5	-5	14	470	-468	1	1	14	385	367	-4	-2	16	549	-519
3	-1	12	319	-347	-3	5	12	539	-556	-3	-5	14	574	-544	-8	2	14	651	594	-2	-2	16	139	-176
-8	0	12	485	-453	-1	5	12	76	23	-1	-5	14	472	-505	-6	2	14	226	-216	-5	-1	16	93	105
-6	0	12	200	168	1	5	12	481	472	-8	-4	14	673	-651	-4	2	14	120	-122	-3	-1	16	200	209
-4	0	12	587	-565	-6	6	12	559	-512	-6	-4	14	65	-74	-2	2	14	699	706	-6	0	16	92	-105
-2	0	12	862	-873	-4	6	12	332	-349	-4	-4	14	87	-77	0	2	14	42	58	-4	0	16	390	414
0	0	12	89	-100	-2	6	12	158	-159	-2	-4	14	454	-447	-7	3	14	453	435	-2	0	16	191	187
2	0	12	636	-626	0	6	12	912	-914	0	-4	14	273	295	-5	3	14	813	799	-5	1	16	260	-276
-9	1	12	416	384	-7	7	12	186	158	-7	-3	14	1090	1066	-3	3	14	832	813	-3	1	16	585	-624
-7	1	12	217	207	-5	7	12	118	107	-5	-3	14	15	21	-1	3	14	296	282	-6	2	16	212	-211
-5	1	12	893	-904	-3	7	12	206	191	-3	-3	14	781	808	-6	4	14	427	422	-4	2	16	522	535
-3	1	12	1756	1808	-1	7	12	44	-13	-1	-3	14	700	657	-4	4	14	720	713	-2	2	16	185	219
-1	1	12	515	-524	1	7	12	425	397	1	-3	14	395	-391	-2	4	14	132	116	-5	3	16	75	27
1	1	12	31	-9	-6	8	12	376	353	-8	-2	14	52	29	0	4	14	843	842	-3	3	16	219	-223
-8	2	12	312	-269	-4	8	12	267	268	-6	-2	14	636	602										

Anhang C Strukturdaten der Probe $An_{78.6}$

Tabelle C 1:

Strukturparameter mit Standardabweichungen für $An_{78.6}$.
Die T-Atome mit Platzbesetzungszahl K = 0.45(0.55) entsprechen Al(Si)-Atomen.

ATOM	X/A	Y/B	Z/C	K	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Ca(O)	.2698(5)	.0023(4)	.0715(4)	.79	.0128(20)	.1835(51)	.1086(37)	-.1263(37)	-.0068(22)	.0121(26)
Na(O)	.2698(5)	.0023(4)	.0715(4)	.21	.0128(20)	.1835(51)	.1086(37)	-.1263(37)	-.0068(22)	.0121(26)
Ca(z)	.2669(4)	.0267(3)	.5503(3)	.79	.0160(16)	.0448(19)	.0378(18)	-.0231(14)	.0007(14)	.0098(13)
Na(z)	.2669(4)	.0267(3)	.5503(3)	.21	.0160(16)	.0448(19)	.0378(18)	-.0231(14)	.0007(14)	.0098(13)
T_1(OO)	.0076(4)	.1595(2)	.1047(2)	.45	.0102(17)	.0107(16)	.0068(15)	.0028(12)	.0047(14)	-.0001(13)
T_1(OO)	.0076(4)	.1595(2)	.1047(2)	.55	.0102(17)	.0107(16)	.0068(15)	.0028(12)	.0047(14)	-.0001(13)
T_1(Oz)	.0030(5)	.1647(2)	.6107(2)	.45	.0170(19)	.0171(18)	.0116(17)	.0013(14)	.0059(15)	-.0009(14)
T_1(Oz)	.0030(5)	.1647(2)	.6107(2)	.55	.0170(19)	.0171(18)	.0116(17)	.0013(14)	.0059(15)	-.0009(14)
T_1(mO)	.9996(4)	.8156(2)	.1185(2)	.45	.0162(19)	.0141(17)	.0111(17)	.0012(13)	.0064(15)	.0020(14)
T_1(mO)	.9996(4)	.8156(2)	.1185(2)	.55	.0162(19)	.0141(17)	.0111(17)	.0012(13)	.0064(15)	.0020(14)
T_1(mz)	.0059(4)	.8178(2)	.6127(2)	.45	.0102(18)	.0116(16)	.0078(16)	.0011(13)	.0041(14)	.0034(13)
T_1(mz)	.0059(4)	.8178(2)	.6127(2)	.55	.0102(18)	.0116(16)	.0078(16)	.0011(13)	.0041(14)	.0034(13)
T_2(OO)	.6879(4)	.1116(2)	.1573(2)	.45	.0143(19)	.0120(17)	.0153(17)	.0026(13)	.0062(15)	.0009(14)
T_2(OO)	.6879(4)	.1116(2)	.1573(2)	.55	.0143(19)	.0120(17)	.0153(17)	.0026(13)	.0062(15)	.0009(14)
T_2(Oz)	.6788(4)	.1060(2)	.6591(2)	.45	.0093(17)	.0086(16)	.0103(16)	.0003(12)	.0034(14)	.0005(13)
T_2(Oz)	.6788(4)	.1060(2)	.6591(2)	.55	.0093(17)	.0086(16)	.01o3(16)	.0003(12)	.0034(14)	.0005(13)
T_2(mO)	.6780(4)	.8814(2)	.1816(2)	.45	.0107(17)	.0081(16)	.0124(16)	.0036(13)	.0044(14)	.0017(13)
T_2(mO)	.6780(4)	.8814(2)	.1816(2)	.55	.0107(17)	.0081(16)	.0124(16)	.0036(13)	.0044(14)	.0017(13)

ATOM	X/A	Y/B	Z/C	K	U11	U22	U33	U23	U13	U12
T_2(mz)	.6828(4)	.8757(2)	.6761(2)	.45	.0134(19)	.0131(17)	.0141(17)	.0021(13)	.0047(15)	-.0007(14)
T_2(mz)	.6828(4)	.8757(2)	.6761(2)	.55	.0134(19)	.0131(17)	.0141(17)	.0021(13)	.0047(15)	-.0007(14)
O_A(1O)	.0092(11)	.1279(6)	.9906(6)	1.00	.0310(54)	.0166(43)	.0192(44)	.0001(34)	.0145(41)	-.0000(37)
O_A(1z)	.9943(11)	.1263(6)	.4892(6)	1.00	.0276(52)	.0203(44)	.0134(42)	.0061(34)	.0119(39)	.0071(37)
O_A(2O)	.5792(1O)	.9912(5)	.1398(6)	1.00	.0150(46)	.0145(42)	.0160(42)	.0076(33)	.0070(37)	.0022(34)
O_A(2z)	.5759(1O)	.9911(5)	.6382(5)	1.00	.0092(44)	.0134(41)	.0148(42)	-.0012(32)	.0030(35)	.0010(32)
O_B(OO)	.8199(11)	.1025(6)	.0912(6)	1.00	.0187(47)	.0152(43)	.0265(47)	.0022(36)	.0080(4O)	.0019(35)
O_B(Oz)	.8032(11)	.1025(6)	.596O(6)	1.00	.0188(47)	.0166(43)	.0303(49)	-.0047(36)	.0135(41)	-.0066(35)
O_B(mO)	.8112(11)	.8541(6)	.1294(6)	1.00	.0210(49)	.0198(44)	.0395(53)	.0041(39)	.0141(43)	.0048(37)
O_B(mz)	.8212(11)	.8547(6)	.6149(7)	1.00	.0238(51)	.0212(45)	.0399(51)	-.0035(39)	.0184(44)	.0008(37)
O_C(OO)	.0131(11)	.2810(6)	.1368(6)	1.00	.0186(46)	.0238(45)	.0163(42)	.0044(35)	.0075(37)	.0021(36)
O_C(Oz)	.0167(11)	.2936(6)	.6465(6)	1.00	.0203(47)	.0205(44)	.0157(41)	.0021(34)	.0074(37)	-.0005(35)
O_C(mO)	.0107(11)	.6827(6)	.1082(6)	1.00	.0211(48)	.0191(43)	.0156(43)	-.0018(34)	.0087(38)	.0040(36)
O_C(mz)	.0120(11)	.6914(6)	.6029(6)	1.00	.0202(48)	.0279(47)	.0088(41)	-.0032(34)	.0033(37)	.0029(37)
O_D(OO)	.1904(11)	.1068(6)	.1886(6)	1.00	.0278(52)	.0149(42)	.0175(44)	.0050(34)	.0095(4O)	.0004(36)
O_D(Oz)	.2022(11)	.1053(6)	.6905(6)	1.00	.0138(46)	.0193(44)	.0198(45)	-.0022(35)	-.0003(37)	.0002(35)
O_D(mO)	.1957(11)	.8683(6)	.2171(6)	1.00	.0179(49)	.0175(45)	.0275(49)	-.0088(37)	.0006(4O)	.0038(36)
O_D(mz)	.1831(12)	.8618(6)	.7139(7)	1.00	.0289(56)	.0264(5O)	.0318(53)	-.0000(41)	.0089(45)	.0058(41)

Tabelle C 2:

T-O-Bindungslängen mit Standardabweichung für $An_{78.6}$

Atome	Längen [Å]	Atome	Längen [Å]
$T_1(00) - O_A(10)$	1.653(7)	$T_1(0z) - O_A(1z)$	1.738(7)
$- O_B(00)$	1.621(8)	$- O_B(0z)$	1.732(8)
$- O_C(00)$	1.598(8)	$- O_C(0z)$	1.694(8)
$- O_D(00)$	1.634(8)	$- O_D(0z)$	1.740(8)
Mittelwert:	1.627	Mittelwert:	1.726
$T_1(m0) - O_A(10c)$	1.723(7)	$T_1(mz) - O_A(1zc)$	1.653(7)
$- O_B(m0)$	1.690(8)	$- O_B(mz)$	1.601(8)
$- O_C(m0)$	1.716(8)	$- O_C(mz)$	1.628(8)
$- O_D(m0)$	1.696(8)	$- O_D(mz)$	1.593(9)
Mittelwert:	1.706	Mittelwert:	1.619

Atome	Längen [Å]	Atome	Längen [Å]
T_2(OO) - O_A(2O)	1.726(7)	T_2(Oz) - O_A(2z)	1.639(7)
- O_B(OO)	1.716(8)	- O_B(Oz)	1.625(7)
- O_C(mzi)	1.695 +)	- O_C(mOi)	1.621 +)
- O_D(mzc)	1.671(9)	- O_D(mOc)	1.609(8)
Mittelwert:	1.702	Mittelwert:	1.624
T_2(mO) - O_A(2O)	1.646(7)	T_2(mz) - O_A(2z)	1.724(7)
- O_B(mO)	1.597(8)	- O_B(mz)	1.718(8)
- O_C(Ozi)	1.607 +)	- O_C(OOi)	1.709 +)
- O_D(Ozc)	1.637(8)	- O_D(OOc)	1.734(8)
Mittelwert:	1.622	Mittelwert:	1.721

Aus programmtechnischen Gründen konnten für die mit +) bezeichneten Atomabstände keine Standardabweichungen ermittelt werden. Sie dürften jedoch in der gleichen Größenordnung wie die anderen Werte liegen.

Tabelle C 3:

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR AN79 MO A-REFLEXE

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
2	0	0	203	-259	2	4	0	930	941	6	8	0	107	112	1	15	0	343	-365	-6	-8	2	201	-273
4	0	0	2557	2667	4	4	0	76	31	-7	9	0	156	-142	-1	-15	2	501	446	-4	-8	2	464	498
6	0	0	1944	1988	6	4	0	1767	-1764	-5	9	0	801	-802	1	-15	2	792	710	-2	-8	2	1956	1949
8	0	0	41	17	8	4	0	673	627	-3	9	0	279	-263	-2	-14	2	74	-42	0	-8	2	907	-889
-7	1	0	842	837	-7	5	0	315	314	-1	9	0	522	-543	0	-14	2	584	697	2	-8	2	1068	1067
-5	1	0	322	338	-5	5	0	741	773	1	9	0	1851	-1915	2	-14	2	156	71	4	-8	2	1076	1100
-3	1	0	879	902	-3	5	0	311	-327	3	9	0	82	12	-3	-13	2	48	74	6	-8	2	481	-441
-1	1	0	517	502	-1	5	0	456	-380	5	9	0	901	-876	1	-13	2	495	-549	-7	-7	2	119	-85
1	1	0	55	26	1	5	0	608	-582	-6	10	0	58	-36	3	-13	2	188	248	-5	-7	2	58	-78
3	1	0	822	888	3	5	0	128	-58	-4	10	0	233	193	-4	-12	2	166	-64	-3	-7	2	386	397
5	1	0	169	174	5	5	0	84	71	-2	10	0	564	-622	-2	-12	2	1086	-1203	-1	-7	2	913	-962
7	1	0	681	688	7	5	0	886	831	0	10	0	906	943	0	-12	2	525	630	1	-7	2	740	774
-8	2	0	407	-371	-8	6	0	1078	984	2	10	0	139	98	2	-12	2	1031	-1129	3	-7	2	31	-40
-6	2	0	1249	-1250	-6	6	0	62	-18	4	10	0	152	-153	4	-12	2	534	-503	5	-7	2	549	-561
-4	2	0	477	-460	-4	6	0	1211	1190	6	10	0	484	413	-5	-11	2	478	-490	7	-7	2	191	153
-2	2	0	2689	-2667	-2	6	0	1391	1419	-5	11	0	598	557	-3	-11	2	610	-659	-8	-6	2	62	10
0	2	0	118	166	0	6	0	1651	1628	-3	11	0	234	264	-1	-11	2	277	-240	-6	-6	2	92	-75
2	2	0	2403	-2417	2	6	0	1553	1602	-1	11	0	297	306	1	-11	2	288	-373	-4	-6	2	586	582
4	2	0	671	-700	4	6	0	1400	1385	1	11	0	142	125	3	-11	2	590	-566	-2	-6	2	684	-690
6	2	0	1242	-1250	6	6	0	370	396	3	11	0	241	284	5	-11	2	96	-121	0	-6	2	174	175
8	2	0	549	-502	-7	7	0	487	469	5	11	0	291	228	-6	-10	2	63	-110	2	-6	2	914	-924
-7	3	0	289	-305	-5	7	0	649	663	-4	12	0	103	-26	-4	-10	2	257	-153	4	-6	2	420	-430
-5	3	0	791	-789	-3	7	0	478	476	-2	12	0	901	820	-2	-10	2	261	208	6	-6	2	199	-189
-3	3	0	686	-755	-1	7	0	1257	1279	0	12	0	397	-324	0	-10	2	743	-671	-7	-5	2	525	514
-1	3	0	1773	-1671	1	7	0	82	42	2	12	0	787	711	2	-10	2	444	-506	-5	-5	2	984	-1051
1	3	0	1896	-1898	3	7	0	982	1012	4	12	0	412	426	4	-10	2	185	200	-3	-5	2	564	-487
3	3	0	500	-551	5	7	0	566	375	-3	13	0	559	-553	6	-10	2	556	-512	-1	-5	2	968	907
5	3	0	1090	-1118	7	7	0	537	497	-1	13	0	120	6	-7	-9	2	227	-170	1	-5	2	991	-965
7	3	0	69	10	-6	8	0	211	-153	1	13	0	477	394	-5	-9	2	497	494	3	-5	2	925	915
-8	4	0	918	868	-4	8	0	345	-348	3	13	0	633	-542	-3	-9	2	412	395	5	-5	2	24	47
-6	4	0	2039	-2039	-2	8	0	2031	-2056	-2	14	0	397	317	-1	-9	2	173	-136	7	-5	2	451	-445
-4	4	0	77	-40	0	8	0	1229	1260	0	14	0	884	-772	1	-9	2	1919	1934	-8	-4	2	674	-699
-2	4	0	722	691	2	8	0	1567	-1569	2	14	0	104	-20	3	-9	2	214	240	-6	-4	2	149	187
0	4	0	2715	-2672	4	8	0	907	-930	-1	15	0	235	-158	5	-9	2	546	498	-4	-4	2	963	963

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-2	-4	2	2619	-2613	-2	0	2	2283	2175	-6	4	2	1137	-1131	0	8	2	306	-323	0	14	2	619	-559
0	-4	2	2149	2098	0	0	2	59	95	-4	4	2	1402	1400	2	8	2	1310	-1317	2	14	2	167	155
2	-4	2	2314	-2293	2	0	2	174	-222	-2	4	2	2037	-2052	4	8	2	276	279	-1	15	2	484	-538
4	-4	2	655	-669	4	0	2	943	988	0	4	2	147	143	6	8	2	571	-507	-1	-15	4	720	825
6	-4	2	572	570	6	0	2	857	-885	2	4	2	396	-365	-7	9	2	1240	-1136	-2	-14	4	768	689
-7	-3	2	437	455	8	0	2	295	276	4	4	2	1473	-1529	-5	9	2	368	349	0	-14	4	315	399
-5	-3	2	924	-968	-9	1	2	367	359	6	4	2	532	511	-3	9	2	1443	-1448	2	-14	4	221	149
-3	-3	2	1269	-1227	-7	1	2	455	-452	-7	5	2	533	490	-1	9	2	788	-842	-3	-13	4	501	586
-1	-3	2	1074	994	-5	1	2	1023	1062	-5	5	2	766	-767	1	9	2	81	23	-1	-13	4	915	-769
1	-3	2	1775	-1718	-3	1	2	457	-475	-3	5	2	831	-844	3	9	2	548	-571	1	-13	4	830	702
3	-3	2	798	808	-1	1	2	44	21	-1	5	2	860	893	5	9	2	448	-439	3	-13	4	434	-285
5	-3	2	152	-114	1	1	2	1417	1319	1	5	2	1888	-1906	-6	10	2	332	300	-4	-12	4	1152	-1013
7	-3	2	291	-297	3	1	2	977	997	3	5	2	1572	1574	-4	10	2	546	-550	-2	-12	4	141	-256
-8	-2	2	49	-74	5	1	2	524	-529	5	5	2	69	-6	-2	10	2	985	998	0	-12	4	779	-752
-6	-2	2	590	-577	7	1	2	1152	1143	7	5	2	106	-169	0	10	2	26	2	2	-12	4	826	-848
-4	-2	2	762	772	-8	2	2	305	278	-8	6	2	573	524	2	10	2	377	-395	4	-12	4	186	110
-2	-2	2	818	-806	-6	2	2	821	-835	-6	6	2	144	138	4	10	2	341	287	-5	-11	4	708	-625
0	-2	2	861	863	-4	2	2	313	305	-4	6	2	2059	2066	-5	11	2	383	370	-3	-11	4	231	-347
2	-2	2	986	-1007	-2	2	2	350	-368	-2	6	2	214	229	-3	11	2	129	108	-1	-11	4	1428	-1525
4	-2	2	462	498	0	2	2	26	76	0	6	2	1209	1198	-1	11	2	142	125	1	-11	4	199	-338
6	-2	2	71	-14	2	2	2	936	-959	2	6	2	748	786	1	11	2	241	242	3	-11	4	972	-889
8	-2	2	321	316	4	2	2	33	-42	4	6	2	263	-278	3	11	2	499	536	5	-11	4	765	-836
-9	-1	2	211	222	6	2	2	134	-103	6	6	2	626	579	5	11	2	205	160	-6	-10	4	297	-358
-7	-1	2	503	-520	8	2	2	71	1	-7	7	2	90	134	-4	12	2	999	1008	-4	-10	4	13	99
-5	-1	2	606	654	-9	3	2	261	-229	-5	7	2	1071	1062	-2	12	2	254	201	-2	-10	4	815	-890
-3	-1	2	242	-244	-7	3	2	81	-4	-3	7	2	275	-258	0	12	2	53	6	0	-10	4	255	-203
-1	-1	2	223	-195	-5	3	2	750	-731	-1	7	2	1015	1024	2	12	2	1091	1070	2	-10	4	68	56
1	-1	2	1150	1087	-3	3	2	1376	-1400	1	7	2	326	366	4	12	2	604	-574	4	-10	4	162	-173
3	-1	2	918	916	-1	3	2	513	549	3	7	2	771	734	-5	13	2	137	-160	-7	-9	4	1273	1166
5	-1	2	606	-618	1	3	2	2023	-2051	5	7	2	52	103	-3	13	2	154	123	-5	-9	4	452	505
7	-1	2	925	892	3	3	2	861	894	-8	8	2	223	-219	-1	13	2	391	387	-3	-9	4	1081	1003
-8	0	2	1432	1397	5	3	2	679	-702	-6	8	2	166	-132	1	13	2	331	-382	-1	-9	4	2155	2304
-6	0	2	30	28	7	3	2	186	-203	-4	8	2	1183	-1220	3	13	2	408	435	1	-9	4	554	452
-4	0	2	1292	1305	-8	4	2	241	-248	-2	8	2	326	363	-2	14	2	673	-679	3	-9	4	792	878

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR AN79 MO A-REFLEXE

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
5	-9	4	1103	1021	-4	-4	4	1670	-1669	-4	0	4	991	999	-4	4	4	1454	-1461	2	8	4	2287	2290
-8	-8	4	742	745	-2	-4	4	442	-459	-2	0	4	3573	-3511	-2	4	4	863	885	4	8	4	355	-324
-6	-8	4	366	296	0	-4	4	80	31	0	0	4	3502	-3390	0	4	4	617	630	-7	9	4	58	18
-4	-8	4	2031	2131	2	-4	4	1931	-1979	2	0	4	567	541	2	4	4	1311	-1322	-5	9	4	941	931
-2	-8	4	228	153	4	-4	4	1190	1230	4	0	4	2555	-2604	4	4	4	1109	1136	-3	9	4	262	-222
0	-8	4	1188	1200	6	-4	4	123	-105	6	0	4	210	-214	6	4	4	534	531	-1	9	4	1272	1296
2	-8	4	1639	1675	-9	-3	4	597	569	-9	1	4	327	-312	-9	5	4	375	320	1	9	4	845	884
4	-8	4	447	407	-7	-3	4	256	-175	-7	1	4	345	-353	-7	5	4	1076	-1064	3	9	4	152	121
6	-8	4	855	809	-5	-3	4	943	924	-5	1	4	336	307	-5	5	4	93	-18	5	9	4	795	759
-7	-7	4	186	154	-3	-3	4	447	555	-3	1	4	472	-517	-3	5	4	808	-833	-6	10	4	495	-481
-5	-7	4	599	-569	-1	-3	4	1229	1165	-1	1	4	1816	1788	-1	5	4	893	861	-4	10	4	643	659
-3	-7	4	366	-436	1	-3	4	598	668	1	1	4	179	-234	1	5	4	1040	-1053	-2	10	4	24	-7
-1	-7	4	541	621	3	-3	4	1109	1109	3	1	4	316	332	3	5	4	647	631	0	10	4	1083	-1089
1	-7	4	876	-945	5	-3	4	297	-266	5	1	4	216	-244	5	5	4	1127	-1100	2	10	4	947	906
3	-7	4	227	-181	7	-3	4	1075	1009	7	1	4	283	-259	-8	6	4	456	-431	4	10	4	747	-676
5	-7	4	165	-173	-8	-2	4	1006	968	-8	2	4	959	915	-6	6	4	162	181	-5	11	4	176	-220
-8	-6	4	341	-299	-6	-2	4	1003	1068	-6	2	4	179	-161	-4	6	4	1868	-1921	-3	11	4	572	-582
-6	-6	4	716	-754	-4	-2	4	1266	1282	-4	2	4	2082	2085	-2	6	4	828	-835	-1	11	4	205	185
-4	-6	4	854	-835	-2	-2	4	1190	1123	-2	2	4	243	235	0	6	4	1345	-1367	1	11	4	276	-299
-2	-6	4	1408	-1470	0	-2	4	1773	1775	0	2	4	75	83	2	6	4	1802	-1820	3	11	4	164	-186
0	-6	4	1060	-1044	2	-2	4	975	947	2	2	4	1897	1919	4	6	4	667	-661	-6	12	4	489	459
2	-6	4	1214	-1241	4	-2	4	1173	1213	4	2	4	74	-4	6	6	4	283	-270	-4	12	4	931	-905
4	-6	4	311	-302	6	-2	4	973	943	6	2	4	1017	986	-7	7	4	764	-751	-2	12	4	77	-28
6	-6	4	695	-645	-9	-1	4	274	-290	-9	3	4	538	526	-5	7	4	243	245	0	12	4	348	-335
-7	-5	4	1019	-1007	-7	-1	4	320	-303	-7	3	4	305	-277	-3	7	4	674	-694	2	12	4	861	-844
-5	-5	4	168	-204	-5	-1	4	110	-173	-5	3	4	888	899	-1	7	4	274	250	-5	13	4	404	-376
-3	-5	4	109	-108	-3	-1	4	898	-873	-3	3	4	619	-614	1	7	4	268	-257	-3	13	4	286	257
-1	-5	4	584	-648	-1	-1	4	1230	1165	-1	3	4	1747	1774	3	7	4	52	-86	-1	13	4	374	-321
1	-5	4	166	-149	1	-1	4	1076	-1087	1	3	4	523	-507	5	7	4	410	-394	1	13	4	202	-240
3	-5	4	262	-293	3	-1	4	87	-80	3	3	4	1114	1163	-8	8	4	776	713	-2	14	4	271	239
5	-5	4	1408	-1391	5	-1	4	549	-553	5	3	4	287	-277	-6	8	4	217	-217	0	14	4	477	476
7	-5	4	297	236	7	-1	4	382	-368	7	3	4	535	510	-4	8	4	1823	1834	-2	-14	6	103	-89
-8	-4	4	66	80	-8	0	4	108	45	-8	4	4	145	142	-2	8	4	615	638	0	-14	6	84	-92
-6	-4	4	742	772	-6	0	4	2564	-2632	-6	4	4	1500	1507	0	8	4	257	-258	-3	-13	6	342	-512

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR AN79 MO A-REFLEXE

H	K	L	10FO	10FC
-1	-13	6	180	331
1	-13	6	51	-86
-4	-12	6	501	523
-2	-12	6	237	-220
0	-12	6	422	-513
2	-12	6	624	703
-5	-11	6	147	325
-1	-11	6	177	-26
1	-11	6	286	159
3	-11	6	290	-191
-6	-10	6	67	-75
-2	-10	6	109	-97
0	-10	6	580	506
2	-10	6	114	26
4	-10	6	288	151
-7	-9	6	301	149
-5	-9	6	384	-217
-3	-9	6	824	676
-1	-9	6	718	-604
1	-9	6	604	-701
3	-9	6	315	366
5	-9	6	851	-827
-8	-8	6	432	-335
-6	-8	6	996	979
-4	-8	6	916	-938
-2	-8	6	86	117
0	-8	6	1355	1325
2	-8	6	1096	-1058
4	-8	6	713	608
-7	-7	6	448	358
-5	-7	6	339	-246
-3	-7	6	906	827
-1	-7	6	502	605
1	-7	6	567	-634
3	-7	6	1063	1091
5	-7	6	221	-166
-8	-6	6	150	-93
-6	-6	6	165	-197
-4	-6	6	463	-482
-2	-6	6	90	6
0	-6	6	327	272
2	-6	6	117	-69
4	-6	6	224	215
6	-6	6	158	-131
-9	-5	6	395	-347
-7	-5	6	218	-249
-5	-5	6	521	586
-3	-5	6	933	-1014
-1	-5	6	167	-87
1	-5	6	404	-468
3	-5	6	917	-915
5	-5	6	139	120
-8	-4	6	619	623
-6	-4	6	1650	-1698
-4	-4	6	961	994
-2	-4	6	661	-625
0	-4	6	935	-932
2	-4	6	1610	1658
4	-4	6	573	-550
6	-4	6	86	-71
-9	-3	6	146	87
-7	-3	6	276	-296
-5	-3	6	1739	1787
-3	-3	6	715	-742
-1	-3	6	134	-43
1	-3	6	709	709
3	-3	6	936	-947
5	-3	6	383	387
-8	-2	6	675	709
-6	-2	6	302	-346
-4	-2	6	691	748
-2	-2	6	110	-160
0	-2	6	135	-77
2	-2	6	999	963
4	-2	6	433	-429
6	-2	6	198	145
-9	-1	6	110	97
-7	-1	6	270	-249
-5	-1	6	95	35
-3	-1	6	92	89
-1	-1	6	498	482
1	-1	6	1227	-1238
3	-1	6	644	644
5	-1	6	487	-465
-8	0	6	995	-993
-6	0	6	359	340
-4	0	6	2210	-2151
-2	0	6	79	-159
0	0	6	449	461
2	0	6	683	-720
4	0	6	59	-6
-9	1	6	347	287
-7	1	6	25	60
-5	1	6	439	-498
-3	1	6	712	718
-1	1	6	1147	1111
1	1	6	2184	-2210
3	1	6	1160	1176
5	1	6	839	-842
-8	2	6	69	-32
-6	2	6	1044	1061
-4	2	6	609	-609
-2	2	6	963	943
0	2	6	536	550
2	2	6	671	673
4	2	6	106	81
6	2	6	635	595
-9	3	6	591	507
-7	3	6	200	-189
-5	3	6	1470	1494
-3	3	6	162	-164
-1	3	6	963	1005
1	3	6	241	243
3	3	6	107	138
5	3	6	493	468
-8	4	6	761	740
-6	4	6	233	-226
-4	4	6	106	96
-2	4	6	806	869
0	4	6	1167	-1206
2	4	6	1672	1709
4	4	6	387	-398
6	4	6	191	171
-7	5	6	147	-115
-5	5	6	1110	-1088
-3	5	6	1436	1469
-1	5	6	1608	-1639
1	5	6	153	-148
3	5	6	247	244
5	5	6	1670	-1681
-4	6	6	559	-326
-2	6	6	1379	-1393
0	6	6	1661	-1710
2	6	6	432	-416
4	6	6	2375	-2412
6	6	6	320	327
-7	7	6	962	-910
-5	7	6	705	-694
-3	7	6	113	86
-1	7	6	479	-497
1	7	6	91	-92
3	7	6	455	-456
5	7	6	427	-431
-8	8	6	102	-71
-6	8	6	169	168
-4	8	6	1285	1284
-2	8	6	549	358
0	8	6	938	950
2	8	6	922	934
4	8	6	1027	993
-7	9	6	218	204
-5	9	6	622	617
-3	9	6	358	369
-1	9	6	1614	1659
1	9	6	944	957
3	9	6	147	157
5	9	6	1169	1142
-6	10	6	777	768
-4	10	6	289	-265
-2	10	6	282	-309
0	10	6	438	451
2	10	6	216	185
-5	11	6	354	-342
-3	11	6	129	-112
-1	11	6	356	-361
1	11	6	503	-506
3	11	6	420	-395
-4	12	6	1265	-1192

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-2	12	6	239	-258	-5	-7	6	1323	1462	5	-3	8	727	-739	-2	2	8	1582	1561	-5	7	8	86	68
0	12	6	1194	-1128	-3	-7	6	190	-279	-8	-2	8	1082	-1089	0	2	8	1001	-1003	-3	7	8	198	225
2	12	6	327	-324	-1	-7	8	112	114	-6	-2	8	965	-962	2	2	8	108	70	-1	7	8	138	-115
-3	13	6	619	-602	1	-7	8	1352	1385	-4	-2	8	1092	-1112	4	2	8	228	-207	1	7	8	239	239
-1	13	6	374	-343	3	-7	6	159	-197	-2	-2	8	1299	-1336	-9	3	8	203	158	3	7	8	61	-47
1	13	6	117	61	-8	-6	8	501	452	0	-2	8	1225	-1272	-7	3	8	366	-348	-8	8	8	250	-213
-3	-13	8	303	174	-6	-6	8	376	456	2	-2	8	801	-801	-5	3	8	52	-40	-6	8	8	338	336
-1	-13	8	202	-115	-4	-6	8	1115	1017	4	-2	8	1297	-1297	-3	3	8	548	-575	-4	8	8	1231	-1243
-4	-12	8	500	391	-2	-6	8	767	923	-9	-1	8	409	391	-1	3	8	618	-603	-2	8	8	1129	1132
-2	-12	8	122	35	0	-6	8	1116	1026	-7	-1	8	109	81	1	3	8	353	-367	0	8	8	866	-865
0	-12	8	994	865	2	-6	8	599	677	-5	-1	8	933	973	3	3	8	531	-510	2	8	8	54	-90
2	-12	8	177	-9	4	-6	8	451	374	-3	-1	8	64	18	5	3	8	107	116	-7	9	8	86	-98
-5	-11	8	240	-123	-9	-5	8	411	475	-1	-1	8	357	394	-8	4	8	1167	-1114	-5	9	8	178	176
-3	-11	8	972	867	-7	-5	8	737	663	1	-1	8	777	756	-6	4	8	265	-296	-3	9	8	509	514
-1	-11	8	788	880	-5	-5	8	48	90	3	-1	8	357	382	-4	4	8	373	-386	-1	9	8	872	-873
1	-11	8	83	-111	-3	-5	8	395	353	5	-1	8	493	462	-2	4	8	1018	-1060	1	9	8	598	563
-4	-10	8	294	126	-1	-5	8	676	729	-8	0	8	903	942	0	4	8	560	-571	3	9	8	338	-296
-2	-10	8	321	494	1	-5	8	282	-253	-6	0	8	1122	1072	2	4	8	46	25	-6	10	8	459	432
0	-10	8	162	-74	3	-5	8	1156	1132	-4	0	8	291	344	4	4	8	1414	-1390	-4	10	8	1078	-1068
2	-10	8	209	-76	5	-5	8	306	336	-2	0	8	3432	3438	-9	5	8	173	113	-2	10	8	1458	1436
-7	-9	8	765	-882	-8	-4	8	512	-556	0	0	8	563	596	-7	5	8	313	345	0	10	8	476	-449
-5	-9	8	384	-270	-6	-4	8	107	151	2	0	8	1432	1408	-5	5	8	268	-273	2	10	8	44	-3
-3	-9	8	1463	-1572	-4	-4	8	766	714	4	0	8	1035	1051	-3	5	8	361	-384	-5	11	8	99	99
-1	-9	8	1237	-1205	-2	-4	8	494	-451	-9	1	8	593	603	-1	5	8	54	53	-3	11	8	146	128
1	-9	8	310	-339	0	-4	8	796	753	-7	1	8	400	-404	1	5	8	541	-558	-1	11	8	655	-625
3	-9	8	1048	-1044	2	-4	8	70	53	-5	1	8	1335	1378	3	5	8	47	-31	1	11	8	324	299
-8	-8	8	65	-54	4	-4	8	708	-746	-3	1	8	281	-300	-8	6	8	775	-772	-4	12	8	72	-62
-6	-8	8	1074	-978	-9	-3	8	324	-326	-1	1	8	509	-480	-6	6	8	625	640	-2	12	8	168	-183
-4	-8	8	467	-627	-7	-3	8	80	-13	1	1	8	1187	1171	-4	6	8	743	760	0	12	8	215	187
-2	-8	8	157	47	-5	-3	8	1842	-1809	3	1	8	326	-340	-2	6	8	281	306	-4	-12	10	272	-409
0	-8	8	921	-1109	-3	-3	8	1094	-1155	5	1	8	432	438	0	6	8	876	881	-2	-12	10	367	537
2	-8	8	660	-515	-1	-3	8	737	-733	-8	2	8	19	39	2	6	8	1236	1248	0	-12	10	51	-81
4	-8	8	270	-327	1	-3	8	2448	-2519	-6	2	8	99	20	4	6	8	329	-325	-5	-11	10	139	145
-7	-7	8	178	-291	3	-3	8	129	122	-4	2	8	1211	-1199	-7	7	8	233	246	-3	-11	10	68	50

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-1	-11	10	584	-417	3	-5	10	495	395	2	0	10	1145	1158	3	5	10	455	400	-3	-9	12	904	1060
1	-11	10	265	314	-8	-4	10	536	217	4	0	10	86	-97	-8	6	10	416	440	-1	-9	12	655	477
-6	-10	10	163	25	-6	-4	10	410	532	-9	1	10	127	-143	-6	6	10	1725	1744	-6	-8	12	804	940
-4	-10	10	71	-139	-4	-4	10	954	-1098	-7	1	10	739	716	-4	6	10	60	89	-4	-8	12	211	66
-2	-10	10	436	-255	-2	-4	10	576	673	-5	1	10	840	885	-2	6	10	1813	1822	-2	-8	12	394	466
0	-10	10	75	-245	0	-4	10	649	-729	-3	1	10	663	-710	0	6	10	621	615	0	-8	12	902	884
2	-10	10	325	-246	2	-4	10	738	-760	-1	1	10	1745	1808	2	6	10	252	238	-7	-7	12	261	-153
-7	-9	10	73	-49	4	-4	10	181	174	1	1	10	687	654	-7	7	10	372	402	-5	-7	12	354	-511
-5	-9	10	424	-432	-9	-3	10	26	90	3	1	10	123	-93	-5	7	10	113	-102	-3	-7	12	1004	1206
-3	-9	10	477	-432	-7	-3	10	1313	-1321	-8	2	10	513	-495	-3	7	10	974	982	-1	-7	12	411	-604
-1	-9	10	737	651	-5	-3	10	1169	-1160	-6	2	10	59	6	-1	7	10	264	-260	1	-7	12	274	-106
1	-9	10	476	-363	-3	-3	10	119	-84	-4	2	10	494	506	1	7	10	944	936	-8	-6	12	99	-43
-6	-8	10	606	-417	-1	-3	10	1618	-1707	-2	2	10	494	-520	-6	8	10	148	-149	-6	-6	12	162	-44
-4	-8	10	1015	804	1	-3	10	161	-84	0	2	10	364	-374	-4	8	10	399	-414	-4	-6	12	340	-418
-2	-8	10	1100	-921	3	-3	10	95	-108	2	2	10	159	143	-2	8	10	355	-349	-2	-6	12	293	-227
0	-8	10	82	-191	-8	-2	10	585	-439	4	2	10	653	-624	0	8	10	587	-566	0	-6	12	370	-357
2	-8	10	166	302	-6	-2	10	523	-275	-9	3	10	427	-376	2	8	10	369	-358	2	-6	12	106	-73
-7	-7	10	376	388	-4	-2	10	1350	-1425	-7	3	10	513	-534	-7	9	10	92	72	-7	-5	12	500	-575
-5	-7	10	44	11	-2	-2	10	46	109	-5	3	10	907	-888	-5	9	10	508	-475	-5	-5	12	73	-241
-3	-7	10	598	-519	0	-2	10	1141	-1182	-3	3	10	709	-767	-3	9	10	1024	-1007	-3	-5	12	698	-494
-1	-7	10	1170	1062	2	-2	10	626	-601	-1	3	10	962	-930	-1	9	10	200	-195	-1	-5	12	76	-252
1	-7	10	539	-389	4	-2	10	210	-122	1	3	10	183	-216	1	9	10	86	-75	1	-5	12	624	-462
3	-7	10	179	68	-9	-1	10	212	249	3	3	10	837	-790	-6	10	10	297	-277	-8	-4	12	230	97
-8	-6	10	488	310	-7	-1	10	175	139	-8	4	10	849	-830	-4	10	10	375	378	-6	-4	12	830	-734
-6	-6	10	309	489	-5	-1	10	124	121	-6	4	10	50	-53	-2	10	10	218	-206	-4	-4	12	290	-367
-4	-6	10	1154	991	-3	-1	10	60	19	-4	4	10	1546	-1568	0	10	10	334	-301	-2	-4	12	282	-289
-2	-6	10	84	254	-1	-1	10	557	526	-2	4	10	16	-20	-5	11	10	115	-110	0	-4	12	915	-933
0	-6	10	485	404	1	-1	10	228	241	0	4	10	1072	-1052	-3	11	10	116	77	2	-4	12	323	281
2	-6	10	428	535	3	-1	10	101	78	2	4	10	822	-810	-1	11	10	148	127	-7	-3	12	229	210
-7	-5	10	60	-36	-8	0	10	451	464	-7	5	10	204	-210	-3	-11	12	1539	-1427	-5	-3	12	1385	1291
-5	-5	10	482	461	-6	0	10	899	920	-5	5	10	836	-851	-4	-10	12	252	-357	-3	-3	12	795	-654
-3	-5	10	460	523	-4	0	10	1853	1871	-3	5	10	1460	1451	-2	-10	12	478	-394	-1	-3	12	1469	1379
-1	-5	10	317	227	-2	0	10	569	618	-1	5	10	1319	-1317	0	-10	12	95	-106	1	-3	12	554	646
1	-5	10	655	776	0	0	10	662	633	1	5	10	860	841	-5	-9	12	721	588	-8	-2	12	620	519

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-6	-2	12	254	331	-7	3	12	126	82	-3	9	12	665	640	0	-2	14	651	786	-5	5	14	862	-818
-4	-2	12	396	384	-5	3	12	369	-382	-1	9	12	240	-234	-7	-1	14	109	36	-3	5	14	210	-178
-2	-2	12	585	623	-3	3	12	728	692	-3	-9	14	126	63	-5	-1	14	86	-223	-1	5	14	151	105
0	-2	12	144	186	-1	3	12	185	-196	-4	-8	14	183	215	-3	-1	14	134	-32	-6	6	14	805	-801
2	-2	12	749	699	1	3	12	329	325	-2	-8	14	1142	1057	-1	-1	14	233	-307	-4	6	14	591	-620
-9	-1	12	205	-227	-8	4	12	279	267	-5	-7	14	1097	906	1	-1	14	167	-113	-2	6	14	1537	-1469
-7	-1	12	367	-324	-4	4	12	42	6	-3	-7	14	449	-290	-8	0	14	272	-280	-5	7	14	668	-652
-5	-1	12	121	-193	-2	4	12	337	376	-1	-7	14	175	22	-6	0	14	771	-771	-3	7	14	90	-94
-3	-1	12	291	-234	0	4	12	159	-161	-6	-6	14	419	-439	-4	0	14	966	-958	-5	-5	16	295	181
-1	-1	12	194	-246	2	4	12	315	341	-4	-6	14	705	-668	-2	0	14	94	-156	-3	-5	16	174	233
1	-1	12	265	-252	-7	5	12	87	-139	-2	-6	14	181	80	0	0	14	802	-712	-6	-4	16	537	597
3	-1	12	404	-455	-5	5	12	127	121	0	-6	14	568	-482	-7	1	14	778	-693	-4	-4	16	312	-86
-8	0	12	508	-503	-3	5	12	435	-449	-7	-5	14	500	-305	-5	1	14	378	338	-2	-4	16	568	445
-6	0	12	282	314	-1	5	12	178	-136	-5	-5	14	307	-474	-3	1	14	270	-225	-5	-3	16	139	-216
-4	0	12	676	-703	1	5	12	520	469	-3	-5	14	663	-490	-1	1	14	1064	-1051	-3	-3	16	161	-121
-2	0	12	679	-683	-6	6	12	545	-541	-1	-5	14	372	-484	1	1	14	453	400	-6	-2	16	104	-78
0	0	12	107	-103	-4	6	12	260	-255	-6	-4	14	103	25	-8	2	14	544	484	-4	-2	16	637	-471
2	0	12	503	-513	-2	6	12	121	-128	-4	-4	14	132	-13	-6	2	14	158	-170	-2	-2	16	69	-147
-9	1	12	479	438	0	6	12	843	-849	-2	-4	14	323	-420	-4	2	14	141	-130	-5	-1	16	130	118
-7	1	12	105	126	-7	7	12	257	224	0	-4	14	259	419	-2	2	14	735	723	-3	-1	16	224	247
-5	1	12	652	-673	-5	7	12	43	48	-7	-3	14	932	1094	-7	3	14	480	452	-4	0	16	296	400
-3	1	12	1583	1626	-3	7	12	294	272	-5	-3	14	102	-89	-5	3	14	794	762	-2	0	16	223	76
-1	1	12	404	-422	-1	7	12	66	-9	-3	-3	14	660	837	-3	3	14	837	800	-5	1	16	283	-324
1	1	12	24	40	1	7	12	541	502	-1	-3	14	702	579	-1	3	14	231	207	-3	1	16	417	-447
-8	2	12	336	-324	-6	8	12	330	319	1	-3	14	439	-324	-6	4	14	470	470	-6	2	16	72	-71
-6	2	12	702	716	-4	8	12	205	219	-8	-2	14	124	-62	-4	4	14	609	619	-4	2	16	544	612
-4	2	12	195	-248	-2	8	12	259	-243	-6	-2	14	690	644	-2	4	14	211	209	-2	2	16	242	204
-2	2	12	257	-259	0	8	12	512	509	-4	-2	14	508	594	0	4	14	781	756	-5	3	16	111	-90
0	2	12	395	356	-5	9	12	833	-828	-2	-2	14	252	123	-7	5	14	578	574	-3	3	16	157	-135
2	2	12	124	-100																				

Tabelle C 4:

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR AN79 MO B-REFLEXE

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
0	-15	1	225	222	6	-9	1	305	288	-5	-4	1	227	301	-5	0	1	74	-25	-1	4	1	164	-274
-5	-14	1	65	-35	-7	-8	1	89	-1	-3	-4	1	187	-275	-3	0	1	45	-65	1	4	1	70	139
-1	-14	1	209	152	-5	-8	1	229	179	-1	-4	1	141	281	-1	0	1	43	68	3	4	1	65	9
1	-14	1	56	9	-3	-8	1	80	48	1	-4	1	189	-296	1	0	1	5	-16	5	4	1	412	116
3	-14	1	52	80	-1	-8	1	207	428	3	-4	1	40	117	3	0	1	51	73	7	4	1	114	-49
-4	-13	1	76	114	1	-8	1	141	-180	5	-4	1	200	-200	7	0	1	56	78	-8	5	1	124	-87
-2	-13	1	78	12	3	-8	1	471	506	7	-4	1	82	13	-8	1	1	109	-13	-6	5	1	145	-152
0	-13	1	281	-158	5	-8	1	58	-94	-8	-3	1	111	151	-6	1	1	221	172	-4	5	1	45	-33
2	-13	1	133	88	7	-8	1	108	150	-6	-3	1	149	-127	-4	1	1	67	126	-2	5	1	256	-269
4	-13	1	143	-24	-6	-7	1	65	8	-4	-3	1	133	-112	-2	1	1	66	31	0	5	1	67	120
-5	-12	1	207	143	-4	-7	1	91	-35	-2	-3	1	156	181	0	1	1	10	30	2	5	1	95	-170
-3	-12	1	250	-207	-2	-7	1	161	-175	0	-3	1	221	-248	2	1	1	47	-30	4	5	1	41	53
-1	-12	1	186	176	0	-7	1	132	-116	2	-3	1	169	189	4	1	1	36	-56	6	5	1	108	83
1	-12	1	75	-34	2	-7	1	61	31	4	-3	1	125	-142	6	1	1	134	-146	-7	6	1	210	250
3	-12	1	67	4	4	-7	1	235	-251	6	-3	1	207	203	8	1	1	131	-33	-5	6	1	171	-285
5	-12	1	91	-37	6	-7	1	110	196	8	-3	1	156	-145	-7	2	1	34	-1	-3	6	1	179	272
-6	-11	1	196	-206	-7	-6	1	387	-384	-7	-2	1	128	125	-5	2	1	120	132	-1	6	1	150	-256
-4	-11	1	59	-25	-5	-6	1	246	298	-5	-2	1	85	-83	-3	2	1	259	266	1	6	1	185	281
-2	-11	1	74	-100	-3	-6	1	174	-248	-3	-2	1	201	-295	-1	2	1	146	-177	3	6	1	56	-15
0	-11	1	212	-170	-1	-6	1	40	106	-1	-2	1	278	397	1	2	1	109	-69	5	6	1	50	35
2	-11	1	94	-41	1	-6	1	331	-395	1	-2	1	144	-62	3	2	1	122	-151	7	6	1	110	99
4	-11	1	140	-108	3	-6	1	125	186	3	-2	1	151	219	7	2	1	345	-319	-8	7	1	141	133
-5	-10	1	86	-138	5	-6	1	144	-147	5	-2	1	47	-101	-8	3	1	102	-92	-6	7	1	45	2
-3	-10	1	310	-277	7	-6	1	214	-156	7	-2	1	349	369	-6	3	1	142	130	-4	7	1	163	116
-1	-10	1	67	100	-6	-5	1	131	119	-8	-1	1	89	-20	-4	3	1	34	39	-2	7	1	170	141
1	-10	1	320	-375	-6	-5	1	41	-44	-6	-1	1	82	-144	-2	3	1	154	-154	0	7	1	125	149
3	-10	1	62	105	-4	-5	1	89	132	-4	-1	1	202	-185	0	3	1	131	181	4	7	1	250	271
5	-10	1	279	-321	-2	-5	1	173	195	-2	-1	1	61	22	2	3	1	93	-167	6	7	1	91	-104
-6	-9	1	171	125	0	-5	1	150	-183	0	-1	1	120	-129	4	3	1	96	39	-7	8	1	261	277
-4	-9	1	65	55	2	-5	1	181	237	2	-1	1	170	178	6	3	1	36	-42	-5	8	1	78	-35
-2	-9	1	80	52	4	-5	1	133	-172	4	-1	1	100	-77	8	3	1	74	60	-3	8	1	223	238
0	-9	1	223	275	6	-5	1	76	53	6	-1	1	249	243	-7	4	1	58	11	-1	8	1	141	-213
2	-9	1	130	128	8	-5	1	121	-186	8	-1	1	80	9	-5	4	1	248	-299	1	8	1	284	330
4	-9	1	66	-44	-7	-4	1	92	-103	-7	0	1	69	59	-3	4	1	191	255	3	8	1	237	-260

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR AN79 MO B=REFLEXE

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-6	9	1	129	49	-3	-14	3	74	-8	1	-8	3	128	47	-8	-3	3	250	-212	-4	1	3	50	-26
-4	9	1	178	-158	-1	-14	3	205	217	3	-8	3	205	81	-6	-3	3	142	166	-2	1	3	50	8
-2	9	1	138	25	1	-14	3	147	-154	5	-8	3	30	-87	-4	-3	3	191	-221	0	1	3	284	-340
0	9	1	88	-38	-4	-13	3	58	138	-8	-7	3	157	188	-2	-3	3	57	124	2	1	3	85	140
2	9	1	241	-278	-2	-13	3	67	-55	-6	-7	3	86	19	0	-3	3	187	-270	4	1	3	218	-228
4	9	1	177	185	0	-13	3	14	84	-4	-7	3	195	-132	2	-3	3	205	318	6	1	3	65	55
6	9	1	284	-274	2	-13	3	88	45	-2	-7	3	404	415	4	-3	3	152	-252	-9	2	3	94	-57
-7	10	1	93	22	-3	-12	3	171	-45	0	-7	3	369	-408	6	-3	3	134	208	-7	2	3	151	-169
-5	10	1	250	-276	-1	-12	3	138	169	2	-7	3	169	232	-9	-2	3	162	203	-5	2	3	177	197
-3	10	1	66	96	1	-12	3	270	-278	4	-7	3	157	-198	-7	-2	3	87	64	-3	2	3	133	-135
-1	10	1	285	-299	3	-12	3	96	77	6	-7	3	125	119	-5	-2	3	56	76	-1	2	3	186	-136
1	10	1	132	189	-6	-11	3	126	-3	-7	-6	3	84	-37	-3	-2	3	62	-18	1	2	3	41	-78
3	10	1	249	-214	-4	-11	3	126	-80	-5	-6	3	171	175	-1	-2	3	269	252	3	2	3	34	42
5	10	1	144	132	-2	-11	3	123	-185	-3	-6	3	186	-219	1	-2	3	57	-10	5	2	3	184	-195
-6	11	1	69	24	0	-11	3	113	-57	-1	-6	3	91	155	3	-2	3	75	-46	7	2	3	69	-18
-4	11	1	89	9	2	-11	3	197	118	1	-6	3	208	-173	5	-2	3	214	195	-8	3	3	137	154
-2	11	1	204	-202	4	-11	3	145	-165	3	-6	3	93	-39	7	-2	3	175	-103	-6	3	3	125	-106
0	11	1	165	171	-5	-10	3	72	29	5	-6	3	178	-145	-8	-1	3	161	-127	-4	3	3	199	188
2	11	1	118	-122	-3	-10	3	158	-204	7	-6	3	46	-18	-6	-1	3	270	293	-2	3	3	74	46
4	11	1	70	47	-1	-10	3	85	-12	-6	-5	3	78	-87	-4	-1	3	143	-233	0	3	3	51	3
-5	12	1	183	-209	1	-10	3	50	-54	-4	-5	3	98	-69	-2	-1	3	257	318	2	3	3	44	4
-3	12	1	280	296	3	-10	3	38	91	-2	-5	3	216	255	0	-1	3	49	-122	6	3	3	65	-35
-1	12	1	84	-67	5	-10	3	149	74	0	-5	3	320	-374	2	-1	3	255	339	-9	4	3	22	-20
1	12	1	41	-19	-6	-9	3	172	128	2	-5	3	283	345	6	-1	3	140	192	-7	4	3	83	82
3	12	1	79	29	-4	-9	3	210	-124	4	-5	3	267	-332	-9	0	3	117	74	-5	4	3	129	102
-4	13	1	221	303	-2	-9	3	278	236	6	-5	3	233	259	-7	0	3	61	-86	-3	4	3	91	50
-2	13	1	254	-246	0	-9	3	242	-181	-7	-4	3	112	-120	-5	0	3	60	5	-1	4	3	103	-132
0	13	1	224	213	2	-9	3	210	214	-5	-4	3	81	-22	-3	0	3	23	-89	1	4	3	60	51
2	13	1	69	-5	4	-9	3	44	-39	-3	-4	3	192	-263	-1	0	3	51	107	3	4	3	73	-59
-3	14	1	166	155	6	-9	3	163	80	-1	-4	3	99	124	1	0	3	68	-101	5	4	3	103	-126
-1	14	1	99	52	-7	-8	3	147	-109	1	-4	3	151	-66	5	0	3	70	28	7	4	3	49	75
1	14	1	105	-34	-5	-8	3	344	379	3	-4	3	80	-45	7	0	3	110	-57	-8	5	3	98	69
0	15	1	70	83	-3	-8	3	111	-63	5	-4	3	107	125	-8	1	3	88	-29	-6	5	3	47	-5
0	-15	3	185	-61	-1	-8	3	147	164	7	-4	3	60	-48	-6	1	3	141	-129	-4	5	3	162	-88

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-2	5	3	29	-87	-1	10	3	123	130	-2	-11	5	359	291	-3	-6	5	273	225	3	-2	5	96	-114
0	5	3	103	187	1	10	3	115	-4	0	-11	5	34	-28	-1	-6	5	39	72	5	-2	5	65	100
2	5	3	254	-286	3	10	3	136	167	2	-11	5	202	223	1	-6	5	69	12	7	-2	5	37	-137
4	5	3	245	251	5	10	3	126	-19	4	-11	5	126	20	3	-6	5	228	-206	-8	-1	5	36	-31
6	5	3	37	-25	-6	11	3	135	-103	-7	-10	5	169	-207	5	-6	5	211	247	-6	-1	5	386	460
-7	6	3	270	290	-4	11	3	139	189	-5	-10	5	209	225	-8	-5	5	181	-139	-4	-1	5	77	-122
-5	6	3	276	-294	-2	11	3	120	-128	-3	-10	5	88	-103	-6	-5	5	192	155	-2	-1	5	348	404
-3	6	3	322	339	0	11	3	143	189	-1	-10	5	69	54	-4	-5	5	322	-348	0	-1	5	119	-27
-1	6	3	137	91	2	11	3	165	-160	1	-10	5	197	132	-2	-5	5	266	326	2	-1	5	283	301
1	6	3	225	267	4	11	3	163	188	3	-10	5	109	112	0	-5	5	280	-348	4	-1	5	81	-77
3	6	3	60	50	-5	12	3	126	58	5	-10	5	148	97	2	-5	5	49	151	6	-1	5	85	27
5	6	3	235	160	-3	12	3	104	66	-6	-9	5	100	-177	4	-5	5	116	-139	-7	0	5	109	-121
-6	7	3	94	-85	-1	12	3	122	-80	-4	-9	5	212	-153	6	-5	5	77	91	-5	0	5	100	110
-4	7	3	142	202	1	12	3	120	52	-2	-9	5	169	-118	-9	-4	5	50	13	-3	0	5	81	-74
-2	7	3	89	-178	3	12	3	86	87	0	-9	5	322	-345	-5	-4	5	227	-227	-1	0	5	161	-186
0	7	3	257	357	-4	13	3	36	47	2	-9	5	135	142	-3	-4	5	214	186	1	0	5	46	123
4	7	3	99	109	-2	13	3	77	9	4	-9	5	272	-256	-1	-4	5	202	-220	3	0	5	107	-135
6	7	3	66	-14	0	13	3	372	343	-7	-8	5	55	-57	1	-4	5	172	184	7	0	5	106	-117
-7	8	3	152	102	2	13	3	223	-237	-5	-8	5	153	69	3	-4	5	126	-161	-8	1	5	154	-182
-5	8	3	413	-413	-3	14	3	150	90	-3	-8	5	132	-219	5	-4	5	159	222	-6	1	5	119	-92
-3	8	3	80	-20	-1	14	3	211	-153	-1	-8	5	149	56	-8	-3	5	213	-204	-4	1	5	265	-344
-1	8	3	195	-191	-3	-14	5	88	18	1	-8	5	96	-82	-6	-3	5	145	192	-2	1	5	17	54
1	8	3	242	-254	-1	-14	5	59	-4	3	-8	5	263	-237	-4	-3	5	390	-439	0	1	5	195	-276
3	8	3	272	-185	1	-14	5	58	-74	5	-8	5	151	111	-2	-3	5	166	232	2	1	5	117	-49
5	8	3	54	-86	-4	-13	5	194	-156	-8	-7	5	67	19	0	-3	5	287	-364	4	1	5	59	-53
-6	9	3	262	-302	-2	-13	5	200	128	-6	-7	5	265	204	2	-3	5	229	267	6	1	5	57	46
-4	9	3	268	299	2	-13	5	59	-43	-4	-7	5	83	112	4	-3	5	175	-181	-9	2	5	139	-94
-2	9	3	356	-452	-5	-12	5	89	67	-2	-7	5	311	303	6	-3	5	96	119	-7	2	5	181	119
0	9	3	53	25	-3	-12	5	90	51	0	-7	5	59	-75	-9	-2	5	124	128	-5	2	5	480	-467
2	9	3	83	-54	-1	-12	5	196	-137	2	-7	5	232	270	-7	-2	5	234	-229	-3	2	5	235	236
4	9	3	111	-85	1	-12	5	77	22	4	-7	5	84	-148	-5	-2	5	381	409	-1	2	5	70	-114
-7	10	3	96	134	3	-12	5	83	47	6	-7	5	69	23	-3	-2	5	85	-75	3	2	5	165	-175
-5	10	3	162	120	-6	-11	5	189	108	-7	-6	5	296	257	-1	-2	5	256	-241	5	2	5	170	162
-3	10	3	52	74	-4	-11	5	157	-99	-5	-6	5	234	-197	1	-2	5	305	370	-8	3	5	98	80

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR AN79 MO B=REFLEXE

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-6	3	5	104	-145	-7	8	5	317	-287	-2	-13	7	48	5	0	-7	7	81	-32	-7	-2	7	112	44
-4	3	5	183	182	-5	8	5	211	-124	0	-13	7	139	-144	2	-7	7	176	-80	-5	-2	7	378	-374
0	3	5	139	-173	-3	8	5	162	-188	-5	-12	7	118	161	4	-7	7	103	-109	-3	-2	7	154	139
2	3	5	57	85	-1	8	5	141	-89	-3	-12	7	161	-213	-7	-6	7	33	-58	-1	-2	7	381	-419
4	3	5	75	-161	1	8	5	221	-233	-1	-12	7	81	110	-5	-6	7	75	113	1	-2	7	207	268
6	3	5	90	10	3	8	5	184	211	1	-12	7	147	80	-3	-6	7	182	145	3	-2	7	240	-292
-9	4	5	73	99	5	8	5	150	-145	-6	-11	7	54	-6	-1	-6	7	182	-162	5	-2	7	137	168
-7	4	5	317	290	-6	9	5	110	-22	-4	-11	7	145	172	1	-6	7	265	270	-8	-1	7	116	-91
-5	4	5	60	16	-4	9	5	131	193	-2	-11	7	150	203	3	-6	7	58	-106	-6	-1	7	343	-308
-3	4	5	135	154	-2	9	5	151	-170	0	-11	7	114	-88	5	-6	7	87	141	-4	-1	7	158	93
-1	4	5	34	65	0	9	5	356	402	2	-11	7	91	200	-8	-5	7	151	-75	-2	-1	7	267	-194
1	4	5	104	88	2	9	5	208	-221	-7	-10	7	303	247	-6	-5	7	467	489	0	-1	7	157	-193
3	4	5	194	-136	4	9	5	146	120	-5	-10	7	113	-34	-4	-5	7	302	-295	2	-1	7	96	-57
5	4	5	158	149	-7	10	5	232	225	-3	-10	7	270	193	-2	-5	7	187	287	4	-1	7	75	-53
-8	5	5	232	205	-5	10	5	130	92	-1	-10	7	96	115	0	-5	7	51	4	6	-1	7	108	-124
-6	5	5	109	98	-3	10	5	262	230	1	-10	7	168	95	2	-5	7	86	13	-9	0	7	181	-125
-4	5	5	314	325	-1	10	5	111	110	3	-10	7	50	11	4	-5	7	74	5	-7	0	7	142	119
-2	5	5	181	176	3	10	5	158	167	-6	-9	7	133	-134	-9	-4	7	49	46	-5	0	7	163	-170
0	5	5	118	103	-6	11	5	88	-188	-4	-9	7	65	-52	-7	-4	7	205	163	-3	0	7	171	210
2	5	5	311	319	-4	11	5	401	458	-2	-9	7	108	27	-5	-4	7	41	116	-1	0	7	235	-300
4	5	5	92	-14	-2	11	5	164	-184	0	-9	7	162	-122	-3	-4	7	231	234	1	0	7	379	405
-7	6	5	128	-117	0	11	5	204	198	2	-9	7	48	50	-1	-4	7	140	-152	3	0	7	238	-314
-5	6	5	214	217	2	11	5	91	-10	4	-9	7	101	-30	1	-4	7	238	298	5	0	7	232	251
-3	6	5	211	-220	-5	12	5	51	31	-7	-8	7	57	-95	3	-4	7	99	-137	-8	1	7	76	-33
-1	6	5	81	122	-3	12	5	155	-151	-5	-8	7	421	-360	5	-4	7	137	156	-6	1	7	148	200
1	6	5	99	-43	-1	12	5	157	148	-3	-8	7	138	65	-8	-3	7	74	-32	-4	1	7	68	-100
3	6	5	32	64	1	12	5	161	-51	-1	-8	7	373	-354	-6	-3	7	54	-18	-2	1	7	198	209
-8	7	5	161	-150	-4	13	5	94	100	1	-8	7	83	-63	-4	-3	7	160	-18	0	1	7	87	48
-6	7	5	150	-159	-2	13	5	112	-85	3	-8	7	142	-170	-2	-3	7	166	182	2	1	7	57	14
-4	7	5	366	-320	0	13	5	183	-160	5	-8	7	75	37	0	-3	7	76	-69	4	1	7	125	130
-2	7	5	229	-265	-3	14	5	353	-342	-8	-7	7	253	-215	2	-3	7	68	121	6	1	7	102	-59
0	7	5	107	-52	-1	14	5	149	58	-6	-7	7	275	216	4	-3	7	120	86	-9	2	7	101	81
2	7	5	238	-243	-1	-14	7	119	-118	-4	-7	7	276	-306	6	-3	7	80	-15	-7	2	7	87	111
4	7	5	56	4	-4	-13	7	138	-114	-2	-7	7	82	57	-9	-2	7	258	-240	-5	2	7	84	-125

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-3	2	7	196	277	-8	7	7	66	-50	0	13	7	69	-10	-7	-6	9	102	11	-8	-1	9	339	-369
-1	2	7	176	-251	-6	7	7	315	-295	-2	-13	9	114	-49	-5	-6	9	58	97	-6	-1	9	362	-343
1	2	7	92	148	-4	7	7	111	104	-5	-12	9	135	-129	-3	-6	9	130	-87	-4	-1	9	220	-263
3	2	7	91	-108	-2	7	7	247	-234	-3	-12	9	101	85	-1	-6	9	128	-144	-2	-1	9	440	-435
5	2	7	90	163	0	7	7	67	-56	-1	-12	9	56	31	1	-6	9	231	244	0	-1	9	116	-64
-8	3	7	72	-73	2	7	7	50	64	1	-12	9	65	-40	3	-6	9	198	-242	2	-1	9	275	-295
-6	3	7	281	328	4	7	7	36	-46	-6	-11	9	124	114	-8	-5	9	162	124	4	-1	9	119	144
-4	3	7	306	-348	-7	8	7	55	-38	-4	-11	9	140	-99	-6	-5	9	100	69	-9	0	9	44	12
-2	3	7	159	199	-5	8	7	267	274	-2	-11	9	168	-108	-4	-5	9	265	233	-7	0	9	124	107
0	3	7	57	-65	-3	8	7	141	-176	0	-11	9	65	-4	-2	-5	9	150	19	-5	0	9	362	-405
2	3	7	139	-151	-1	8	7	209	230	2	-11	9	155	-91	0	-5	9	149	120	-3	0	9	445	469
4	3	7	73	57	1	8	7	240	208	-7	-10	9	154	96	2	-5	9	152	-50	-1	0	9	116	-243
-9	4	7	151	102	-6	9	7	100	-86	-5	-10	9	136	-109	4	-5	9	47	84	1	0	9	113	109
-7	4	7	102	56	-4	9	7	83	50	-3	-10	9	213	204	-9	-4	9	65	7	3	0	9	99	-16
-5	4	7	96	-128	-2	9	7	261	236	-1	-10	9	55	-44	-7	-4	9	400	358	5	0	9	57	83
-3	4	7	301	338	0	9	7	138	-114	1	-10	9	45	14	-5	-4	9	96	165	-8	1	9	186	181
-1	4	7	52	-19	2	9	7	112	40	-6	-9	9	289	272	-3	-4	9	193	196	-6	1	9	88	142
1	4	7	42	57	-7	10	7	55	-102	-4	-9	9	93	-74	-1	-4	9	50	50	-4	1	9	403	401
3	4	7	153	122	-5	10	7	128	122	-2	-9	9	248	256	1	-4	9	244	275	0	1	9	291	329
5	4	7	72	68	-3	10	7	52	-78	0	-9	9	169	79	3	-4	9	145	-123	2	1	9	63	-36
-8	5	7	35	-36	-1	10	7	60	67	2	-9	9	125	67	-8	-3	9	93	1	4	1	9	122	109
-6	5	7	78	95	1	10	7	59	-65	-7	-8	9	62	-107	-6	-3	9	176	197	-9	2	9	125	-80
-4	5	7	154	120	3	10	7	67	-19	-5	-8	9	211	-154	-4	-3	9	234	145	-7	2	9	321	356
-2	5	7	126	-91	-6	11	7	58	52	-3	-8	9	120	30	-2	-3	9	59	56	-5	2	9	240	243
0	5	7	167	125	-4	11	7	74	52	-1	-8	9	230	-239	0	-3	9	313	255	-1	2	9	106	61
2	5	7	55	-30	-2	11	7	149	109	1	-8	9	130	169	2	-3	9	120	-119	1	2	9	205	255
4	5	7	83	-124	0	11	7	76	24	3	-8	9	33	-100	4	-3	9	235	229	3	2	9	129	-110
-7	6	7	127	-93	2	11	7	76	-29	-8	-7	9	81	-89	-9	-2	9	149	-112	-8	3	9	211	190
-5	6	7	108	-62	-5	12	7	121	-19	-6	-7	9	286	-232	-5	-2	9	659	-680	-6	3	9	103	90
-3	6	7	270	-259	-3	12	7	85	-66	-4	-7	9	142	-204	-3	-2	9	287	286	-4	3	9	96	68
-1	6	7	142	-136	-1	12	7	77	64	-2	-7	9	174	-90	-1	-2	9	356	-420	-2	3	9	92	52
1	6	7	139	-152	1	12	7	273	-257	0	-7	9	212	-238	1	-2	9	66	-26	0	3	9	149	162
3	6	7	123	-82	-4	13	7	103	5	2	-7	9	124	-93	3	-2	9	98	-65	2	3	9	100	-83
5	6	7	91	-110	-2	13	7	421	-375	4	-7	9	89	-10	5	-2	9	105	68	4	3	9	108	137

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-9	4	9	353	-357	2	9	9	105	106	-5	-6	11	231	-257	-2	-1	11	124	94	-8	5	11	81	-70
-7	4	9	56	-36	-5	10	9	72	-15	-3	-6	11	161	210	0	-1	11	204	205	-6	5	11	330	-315
-5	4	9	63	-56	-3	10	9	286	-292	-1	-6	11	70	-101	2	-1	11	81	-101	-4	5	11	110	129
-3	4	9	195	-172	-1	10	9	143	120	1	-6	11	151	-88	-9	0	11	181	-154	-2	5	11	239	-285
-1	4	9	169	-206	1	10	9	175	-157	3	-6	11	26	-36	-7	0	11	68	35	0	5	11	40	79
1	4	9	96	106	-4	11	9	172	-206	-8	-5	11	74	-121	-5	0	11	83	-120	2	5	11	73	-20
3	4	9	169	-195	-2	11	9	102	38	-6	-5	11	201	-120	-3	0	11	62	7	-7	6	11	70	60
-8	5	9	143	-151	0	11	9	240	-266	-4	-5	11	387	316	-1	0	11	93	-128	-5	6	11	129	93
-6	5	9	304	-277	-3	12	9	178	-169	-2	-5	11	348	-290	1	0	11	61	-18	-3	6	11	51	48
-4	5	9	401	-406	-1	12	9	95	-17	0	-5	11	153	102	3	0	11	93	40	-1	6	11	191	152
-2	5	9	201	-192	-3	-12	11	183	200	2	-5	11	35	-69	-8	1	11	137	126	1	6	11	130	97
0	5	9	258	-252	-4	-11	11	175	-214	-9	-4	11	86	45	-6	1	11	110	-85	-6	7	11	92	29
2	5	9	360	-330	-2	-11	11	131	-28	-7	-4	11	107	-15	-4	1	11	98	119	-4	7	11	59	36
4	5	9	70	108	0	-11	11	72	-74	-5	-4	11	158	-181	-2	1	11	146	-166	-2	7	11	239	209
-7	6	9	155	-106	-5	-10	11	39	-11	-3	-4	11	127	174	0	1	11	180	191	0	7	11	58	34
-5	6	9	192	-214	-3	-10	11	204	-234	-1	-4	11	152	-168	2	1	11	180	-233	2	7	11	92	18
-3	6	9	182	200	-1	-10	11	208	-188	1	-4	11	137	-32	-9	2	11	59	14	-7	8	11	130	-71
-1	6	9	218	-219	1	-10	11	70	29	3	-4	11	76	-69	-7	2	11	176	198	-5	8	11	55	8
1	6	9	110	87	-6	-9	11	95	63	-8	-3	11	137	61	-5	2	11	41	-35	-3	8	11	131	178
3	6	9	88	-26	-4	-9	11	79	-122	-6	-3	11	189	-55	-3	2	11	208	227	-1	8	11	154	-161
-8	7	9	125	67	-2	-9	11	132	73	-4	-3	11	145	92	-1	2	11	60	49	1	8	11	56	6
-6	7	9	198	173	0	-9	11	95	37	-2	-3	11	255	-185	1	2	11	48	-9	-6	9	11	135	100
-4	7	9	378	350	-7	-8	11	244	205	0	-3	11	120	113	3	2	11	125	88	-4	9	11	162	-146
-2	7	9	147	93	-5	-8	11	102	84	2	-3	11	154	-187	-8	3	11	88	-43	-2	9	11	20	26
0	7	9	329	284	-3	-8	11	35	49	-9	-2	11	200	-94	-6	3	11	130	-112	0	9	11	104	101
2	7	9	131	101	-1	-8	11	230	212	-7	-2	11	19	31	-4	3	11	447	473	-5	10	11	154	-98
-7	8	9	160	149	1	-8	11	156	147	-5	-2	11	154	61	-2	3	11	424	-429	-3	10	11	92	-4
-5	8	9	70	87	-8	-7	11	53	-11	-3	-2	11	69	23	0	3	11	201	276	-1	10	11	134	-137
-3	8	9	258	251	-6	-7	11	86	26	-1	-2	11	120	38	2	3	11	164	-187	-3	-10	13	200	-187
-1	8	9	208	192	-4	-7	11	174	116	1	-2	11	138	143	-7	4	11	14	53	-4	-9	13	142	47
3	8	9	121	40	-2	-7	11	112	-76	3	-2	11	68	55	-5	4	11	156	-144	-2	-9	13	295	-285
-6	9	9	106	-60	0	-7	11	140	77	-8	-1	11	287	194	-3	4	11	252	-226	-5	-8	13	118	83
-4	9	9	154	128	2	-7	11	53	13	-6	-1	11	103	-55	1	4	11	232	-205	-3	-8	13	110	142
-2	9	9	226	-199	-7	-6	11	179	166	-4	-1	11	174	-179	3	4	11	147	-153	-1	-8	13	142	57

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-6	-7	13	174	237	2	-5	13	125	-132	-7	2	13	345	-304	-6	7	13	309	-323	-4	-1	15	160	158
-4	-7	13	204	160	-7	-2	13	273	325	-5	2	13	30	-80	-4	7	13	136	-91	-2	-1	15	88	-143
-2	-7	13	142	115	-5	-2	13	293	229	-3	2	13	191	-176	-2	7	13	240	-257	0	-1	15	149	134
0	-7	13	223	236	-3	-2	13	74	61	-1	2	13	145	-136	-5	8	13	117	-95	-7	0	15	187	-108
-7	-6	13	60	5	-1	-2	13	396	344	1	2	13	190	-200	-3	8	13	304	-326	-5	0	15	156	91
-5	-6	13	96	48	1	-2	13	65	40	-8	3	13	50	21	-4	-7	15	115	66	-1	0	15	149	124
-3	-6	13	155	209	-8	-1	13	305	276	-6	3	13	184	-148	-2	-7	15	51	-24	-6	1	15	81	-67
-1	-6	13	84	-94	-6	-1	13	53	72	-4	3	13	77	-33	-5	-6	15	154	123	-4	1	15	51	12
1	-6	13	57	25	-4	-1	13	555	522	-2	3	13	210	-192	-3	-6	15	157	-160	-2	1	15	168	-205
-8	-5	13	190	67	-2	-1	13	88	51	0	3	13	90	-27	-6	-5	15	211	-164	0	1	15	69	10
-6	-5	13	76	-53	0	-1	13	353	342	-7	4	13	117	-77	-4	-5	15	56	19	-7	2	15	220	-168
-4	-5	13	144	-190	2	-1	13	119	80	-5	4	13	206	180	-2	-5	15	94	66	-5	2	15	65	-45
-2	-5	13	61	-24	-7	0	13	110	145	-3	4	13	240	234	-7	-4	15	92	137	-3	2	15	386	-357
0	-5	13	51	7	-5	0	13	118	48	-1	4	13	52	37	-5	-4	15	86	21	-1	2	15	112	73
-7	-4	13	321	-276	-3	0	13	348	-293	1	4	13	62	-38	-3	-4	15	173	-126	-6	3	15	298	-236
-5	-4	13	245	-259	-1	0	13	290	259	-6	5	13	302	260	-1	-4	15	193	163	-4	3	15	48	-4
-3	-4	13	185	-89	1	0	13	154	-150	-4	5	13	381	398	-6	-3	15	111	-92	-2	3	15	159	105
-1	-4	13	261	-288	-8	1	13	44	-31	-2	5	13	151	72	-4	-3	15	82	27	-5	4	15	363	351
1	-4	13	217	-146	-6	1	13	352	-322	0	5	13	415	421	-2	-3	15	92	45	-3	4	15	68	-13
-8	-3	13	77	-21	-4	1	13	97	-47	-7	6	13	138	110	-7	-2	15	155	-45	-6	5	15	115	65
-6	-3	13	340	-273	-2	1	13	165	-208	-5	6	13	62	21	-5	-2	15	93	-16	-4	5	15	151	118
-2	-3	13	284	-254	0	1	13	91	-73	-3	6	13	64	-66	-1	-2	15	77	-34	-2	5	15	276	245
0	-3	13	88	27	2	1	13	121	-152	-1	6	13	235	199	-6	-1	15	206	165					

Anhang D Ermittlung der Koordinaten $\pm \delta h$, $\pm \delta k$, $\mp \delta l$ einzelner Satellitenreflexe

Die Bestimmung der Satellitenkoordinaten wurde auf einem automatischen Einkristalldiffraktometer (AED) mit Eulerwiegen-Geometrie (nicht ortsfeste Drehachsen Θ, X, Φ, Ω) durchgeführt. Da der Drehwinkel χ der X-Achse nur im Bereich von $-\ 2^{o}$ bis $+\ 90^{o}$ eingestellt werden konnte, konnten Satelliten nur in einem Halbraum der Ewald-Kugel vermessen werden.

Abgesehen von dem Drehwinkel χ wurden die Maxima der Satelliten, die jeweils aus getrennten Winkel-Scans ermittelt wurden, auf $1/100^{o}$ bestimmt. Für den Winkel χ wurde eine maximale Abweichung von $5/100^{o}$ zugelassen, da bei kleinen Beugungswinkeln ϑ und einem χ-Scan Reflexe nur sehr langsam die Ewald-Kugel durchfuhren und somit das Maximum dieses Scans mit geringerer Genauigkeit festzulegen war.

Mit hochindizierten a-Reflexen, die gleichmäßig innerhalb des meßbaren reziproken Raumes verteilt waren, wurden Gittermetriken der verschiedenen Proben erstellt. Auf diese Metriken wurden im weiteren Verlauf die ermittelten Winkel $\vartheta, \chi, \varphi, \omega$ der e-Satelliten bezogen. Aus diesen Werten errechneten sich dann die Koordinaten δh, δk, δl.

Anhand der Arbeit von Klein /31/ wurde nach Satelliten mit hoher Intensität gesucht, die im weiteren vermessen wurden. In den Tabellen D 1 - D 5 sind die Koordinaten $\pm \delta h$, $\pm \delta k$, $\mp \delta l$ der Satelliten und die Indizes (hkl) des jeweiligen b-Reflexes angegeben. Dieser zwischen den e-Satelliten liegende b-Reflex wurde jedoch nicht vermessen, da er insbesondere bei niederen An-Gehalten häufig ausgelöscht war.

Tabelle D 1:
Satellitenkoordinaten der Probe An_{52}

hkl	$+\delta h$	$+\delta k$	$-\delta l$	$-\delta h$	$-\delta k$	$+\delta l$
$\bar{5}85$	.062	.048	-.222	-.066	-.043	.222
$\bar{3}\bar{8}\bar{3}$	.067	.045	-.227	-.055	-.055	.222
$\bar{3}65$	.064	.051	-.225	-.063	-.048	.220
$\bar{2}91$	.065	.044	-.223	-.063	-.049	.221
$\bar{1}\bar{1}\bar{2}\bar{5}$	.075	.050	-.239	-.051	-.053	.199
$\bar{1}\bar{6}\bar{5}$	.069	.049	-.225	-.051	-.049	.211
$\bar{1}145$	.060	.051	-.207	-.071	-.048	.248
$0\bar{9}3$	.061	.054	-.219	-.052	-.042	.199
$0\bar{7}\bar{1}$	.059	.057	-.207	-.058	-.045	.220
071	.066	.045	-.224	-.059	-.058	.212
$09\bar{3}$	.064	.044	-.222	-.057	-.049	.210

Tabelle D 2:
Satellitenkoordinaten der Probe $An_{58.5}$

hkl	$+\delta h$	$+\delta k$	$-\delta l$	$-\delta h$	$-\delta k$	$+\delta l$
$0\bar{9}\bar{3}$	.030	.080	-.166	-.033	-.067	.138
$0\bar{7}\bar{1}$	.031	.074	-.164	-.035	-.074	.146
071	.034	.074	-.145	-.032	-.068	.162
093	.032	.070	-.139	-.033	-.071	.163
$1\bar{6}9$	.030	.063	-.151	-.034	-.085	.158
181	.032	.071	-.140	-.033	-.071	.169
291	.031	.066	-.140	-.037	-.070	.168
$3\bar{6}\bar{5}$	.033	.068	-.158	-.032	-.077	.149
383	.024	.064	-.129	-.036	-.074	.172
$45\bar{1}\bar{1}$	.030	.080	-.152	-.031	-.067	.155
$5\bar{8}\bar{5}$	.036	.062	-.148	-.032	-.078	.160

Tabelle D 3:
Satellitenkoordinaten der Probe $An_{69.7}$

hkl	$+\delta h$	$+\delta k$	$-\delta l$	$-\delta h$	$-\delta k$	$+\delta l$
$0\bar{9}3$	.019	.096	-.108	-.012	-.070	.108
071	.021	.069	-.114	-.010	-.084	.096
$09\bar{3}$	.023	.071	-.112	-.007	-.079	.093
$3\bar{6}\bar{5}$	.023	.082	-.103	-.019	-.059	.121
383	.015	.070	-.109	-.015	-.077	.105
$5\bar{8}\bar{5}$	.017	.072	-.107	-.021	-.068	.107

Tabelle D 4:
Satellitenkoordinaten der Probe An_{70}

hkl	$+\delta h$	$+\delta k$	$-\delta l$	$-\delta h$	$-\delta k$	$+\delta l$
$0\bar{9}3$	.007	.069	-.087	-.014	-.073	.094
$0\bar{7}\bar{1}$	.011	.084	-.096	-.013	-.061	.103
$09\bar{3}$	.016	.071	-.101	-.007	-.070	.084
165	.012	.070	-.103	-.020	-.082	.106
1125	.014	.075	-.105	kein Maximum gefunden		
$2\bar{9}\bar{1}$	.012	.081	-.101	-.018	-.079	.106
$3\bar{6}\bar{5}$	.010	.077	-.095	-.017	-.073	.108
383	.009	.063	-.098	kein Maximum gefunden		

Tabelle D 5:
Satellitenkoordinaten der Probe An_{75}

hkl	$+\delta h$	$+\delta k$	$-\delta l$	$-\delta h$	$-\delta k$	$+\delta l$
071	.001	.078	-.052	-.008	-.070	.085
093	.001	.065	-.048	-.008	-.078	.090
181	.002	.065	-.047	-.004	-.073	.081
$5\bar{8}\bar{5}$	.009	.046	-.045	-.006	-.090	.090

Anhang E Ermittlung der integralen Intensität eines diffusen Reflexes, dargestellt am c-Reflex $(26\bar{7})$ der Probe An_{75}

Die diffuse Streuung von c-Reflexen erstreckt sich bei den hier untersuchten Chemismen über weite Bereiche des reziproken Raumes. Insbesondere in der reziproken Richtung (010) ist sie so ausgedehnt, daß zu ihrer genauen Analyse der Intensitätsverlauf bis zu den jeweils benachbarten b(e)-Reflexen bekannt sein sollte.

Verfolgt man den Reflex $(26\bar{7})$ entlang der reziproken Richtung $(0\bar{1}0)$, so können bei der hier gewählten Orientierung der Probe (die reelle [100]-Achse liegt parallel zur Goniometerkopflängsachse) mit Noromosic-Aufnahmen bei variierenden Azimutwinkeln Schnitte durch diese reziproke Richtung, d. h. Schnitte vom b(e)-Reflex $(27\bar{7})$ durch den diffusen c-Reflex $(26\bar{7})$ zum benachbarten b(e)-Reflex $(25\bar{7})$ aufgenommen werden. Auf den einzelnen Noromosic-Aufnahmen hat man somit zweidimensionale Schnitte durch den dreidimensional ausgedehnten diffusen Reflex erhalten. Die simulierte Weissenberg-Aufnahme (2kl) mit diesem c-Reflex ist im Anhang A, Abb. A 2e dargestellt.

Bezogen auf einen willkürlich festgelegten Nullpunkt des Azimutwinkels α lagen die rechnerisch ermittelten Maxima obiger Reflexe bei:

Reflex	$(27\bar{7})$	α =	105.8°
Reflex	$(26\bar{7})$	α =	113.1°
Reflex	$(25\bar{7})$	α =	121.0°.

Zur Verfügung standen 8 Noromosic-Aufnahmen, die bei den Winkeln $\alpha = 106^{\circ}$ in Schritten von 2° Abstand im Azimutwinkel bis $\alpha = 120^{\circ}$ angefertigt wurden.

Über Auswerteprogramme konnten nun allen Punktkoordinaten dieser Noromosic-Aufnahmen eindeutig nichtganzzahlige Indizes (hkl)

zugeordnet werden. Somit war es auch möglich, die Schnitte der Ewald-Kugel mit dem diffusen Reflex ($26\bar{7}$) bei vorgegebenem Azimutwinkel genau zu lokalisieren. Um die Maxima eines jeden Schnittes wurden Rechtecke in solcher Ausdehnung gelegt, daß die Schwärzung des Schnittes des diffusen Reflexes darin voll enthalten war.

Diese Rechtecke wurden nun, wie in Abschnitt 2.5.4. beschrieben, zweidimensional on-line photometriert (Öffnung des Photometerspalts: 0.1x0.2 mm^2). Anschließend wurden die erhaltenen Schwärzungswerte mit auf den Filmen aufgebrachten Stufenkeilen auf Intensitäten umgerechnet, bezüglich des Untergrundes korrigiert und aufsummiert. Für die einzelnen Noromosic-Aufnahmen ergaben sich die in Tab. E 1 aufgeführten Werte.

Tabelle E 1:
Zweidimensionale Intensitätschnitte durch den Reflex ($26\bar{7}$)

Azimutwinkel α[°]	Zahl der Meßpunkte	Max.Int. [willk.Einh.]	zweidim.Int. [willk.Einh.]	formaler Index
106	1125	1781	67407	$2,6.98,\bar{7}$
108	1230	188	23018	$2,6.70,\bar{7}$
110	1400	139	17450	$2,6.42,\bar{7}$
112	1200	759	47974	$2,6.15,\bar{7}$
114	1200	1510	52965	$2,5.89,\bar{7}$
116	1350	112	13658	$2,5.60,\bar{7}$
118	1750	68	10713	$2,5.37,\bar{7}$
120	1505	451	17884	$2,5.12,\bar{7}$

Die einzelnen Intensitätswerte dieser Schnitte sind in den Abb. E 1a - h dargestellt. Zur besseren Veranschaulichung werden hier jedoch nicht die pro Meßpunkt ermittelten Intensitätswerte, sondern Plots mit Isointensitätslinien abgebildet. Der Abstand zwischen durchgezogenen (gestrichelten) Linien entspricht dabei Unterschieden von 10 (100) Intensitätseinheiten.

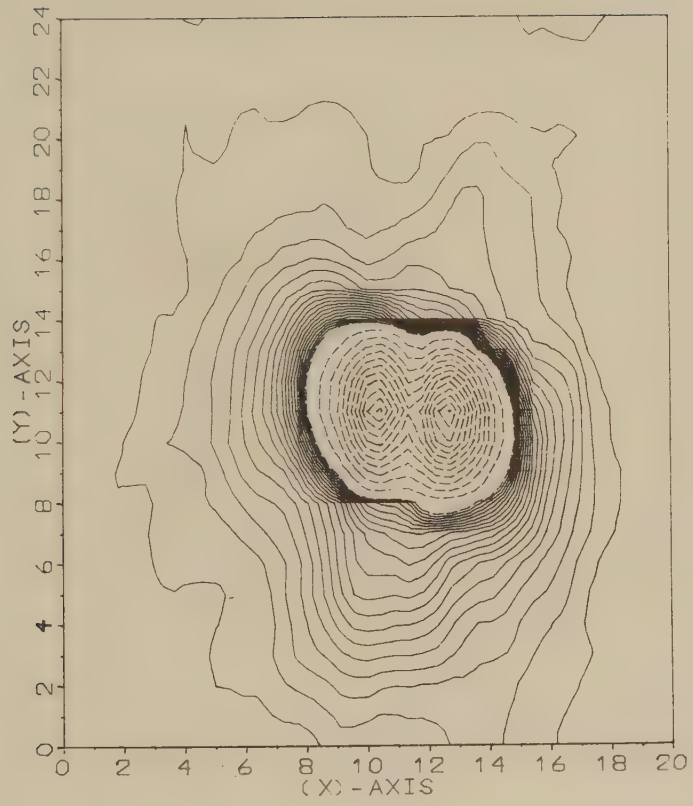

Abb. E 1a: Isointensitätslinien beim Azimutwinkel $\alpha = 106^{\circ}$.
Formaler Index $(2,6.98,\bar{7})$. Zur besseren Veranschaulichung wurde ab der Linie 200 der gestrichelte Linienzug verwendet. Die zweidimensionale Intensität betrug 67407 Intensitätseinheiten.

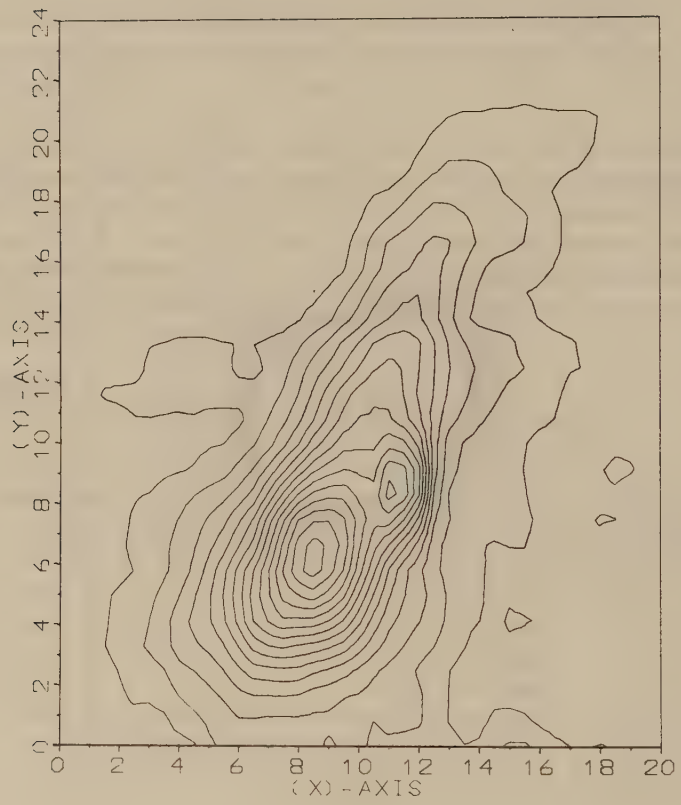

Abb. E 1b: Isointensitätslinien beim Azimutwinkel $\alpha = 108^{\circ}$. Formaler Index $(2,6.70,\bar{7})$. Die zweidimensionale Intensität betrug 23018 Intensitätseinheiten.

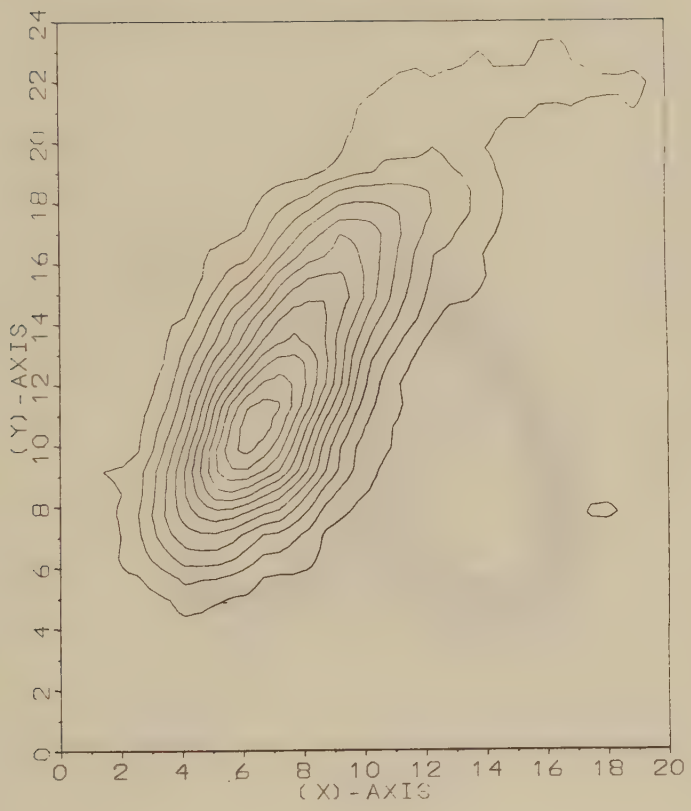

Abb. E 1c: Isointensitätslinien beim Azimutwinkel $\alpha = 110^{\circ}$. Formaler Index $(2,6.42,\bar{7})$. Die zweidimensionale Intensität betrug 17450 Intensitätseinheiten.

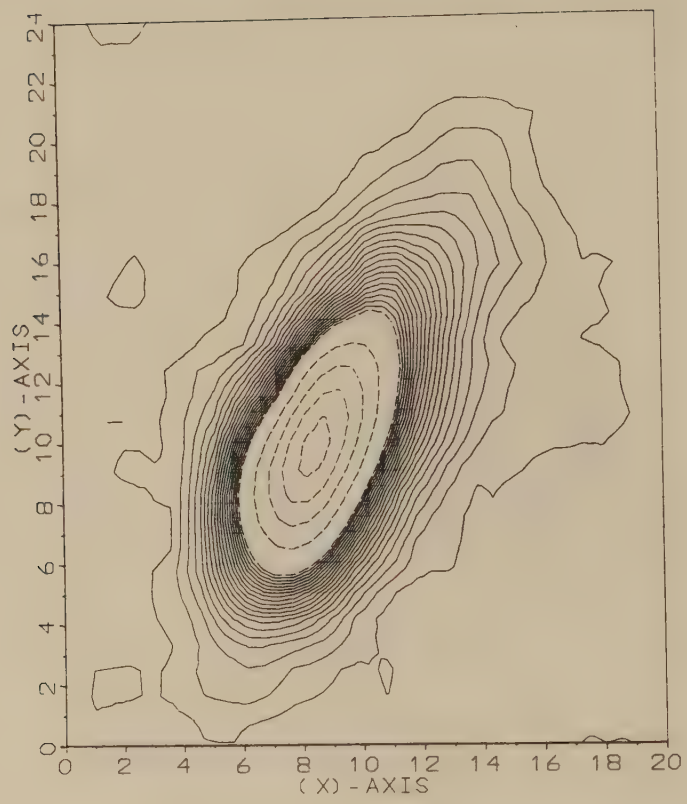

Abb. E 1d: Isointensitätslinien beim Azimutwinkel $\alpha = 112^{o}$.
Formaler Index $(2,6.15,\bar{7})$. Zur besseren Veranschaulichung wurde ab der Linie 200 der gestrichelte Linienzug verwendet. Die zweidimensionale Intensität betrug 47974 Intensitätseinheiten.

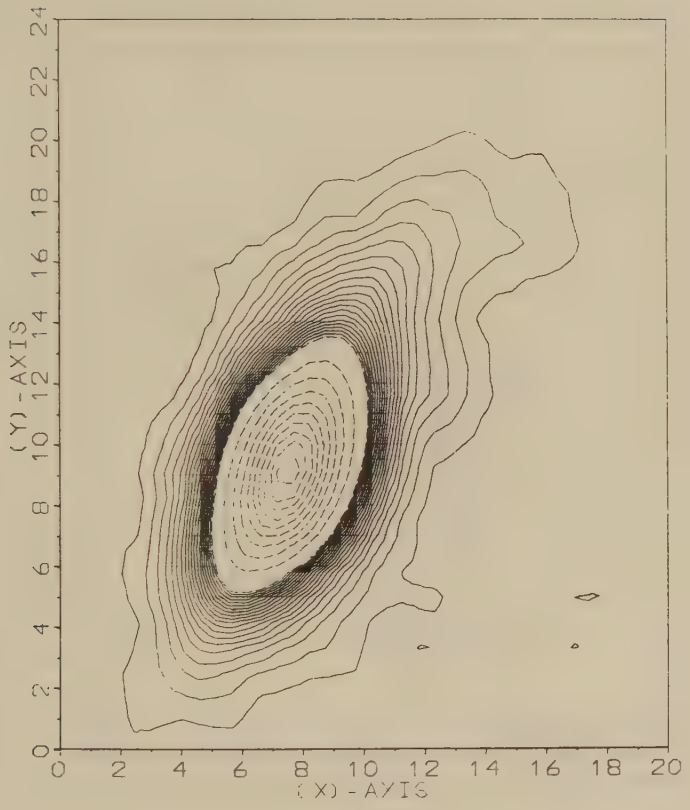

Abb. E 1e: Isointensitätslinien beim Azimutwinkel $\alpha = 114^{\circ}$.

Formaler Index $(2,5.89,\bar{7})$. Zur besseren Veranschaulichung wurde ab der Linie 200 der gestrichelte Linienzug verwendet. Die zweidimensionale Intensität betrug 52965 Intensitätseinheiten.

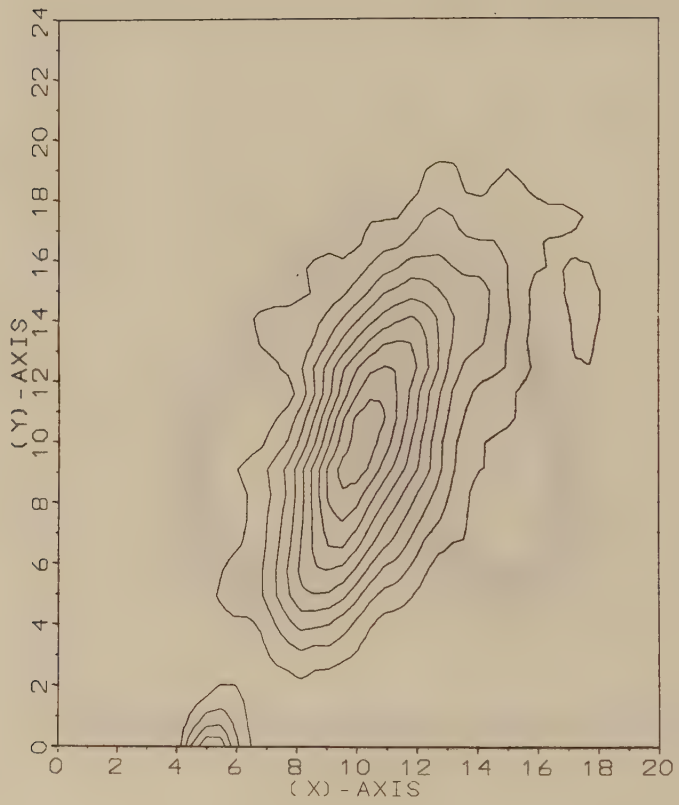

Abb. E 1f: Isointensitätslinien beim Azimutwinkel $\alpha = 116^{\circ}$. Formaler Index $(2,5.60,\bar{7})$. Die zweidimensionale Intensität betrug 13658 Intensitätseinheiten.

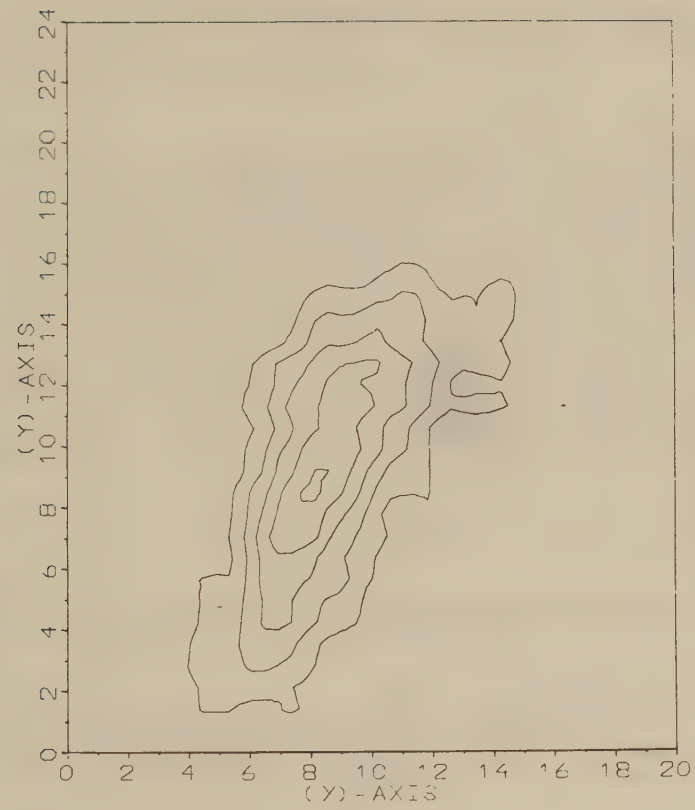

Abb. E 1g: Isointensitätslinien beim Azimutwinkel $\alpha = 118^{\circ}$. Formaler Index $(2,5.37,\bar{7})$. Die zweidimensionale Intensität betrug 10713 Intensitätseinheiten.

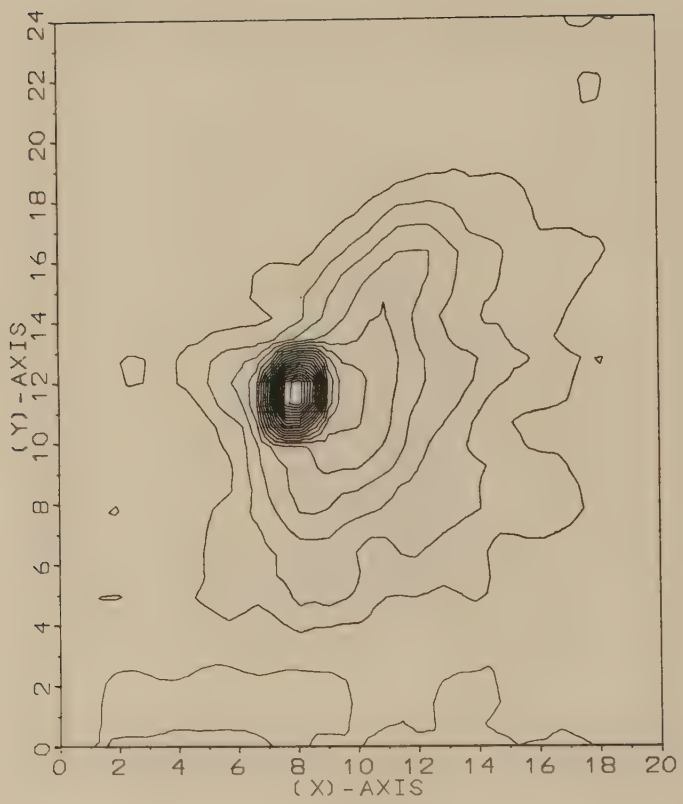

Abb. E 1h: Isointensitätslinien beim Azimutwinkel $\alpha = 120^{\circ}$. Formaler Index $(2,5.12,\bar{7})$. Die zweidimensionale Intensität betrug 17884 Intensitätseinheiten.

Trägt man die zweidimensionalen Intensitätswerte dieser Schnitte entlang der reziproken Richtung $(0\bar{1}0)$ in Abhängigkeit des Azimutwinkels auf, erhält man den im Abschnitt 2.5.4., Abb. 12 dargestellten Intensitätsverlauf.

In diese Stützpunkte wurde nun mit Hilfe der Methode der kleinsten Fehlerquadrate eine Gaußkurve approximiert (Gauß-Fit). Dabei ist die Fläche unter dieser Kurve ein Maß für die dreidimensionale integrale Intensität des c-Reflexes. Um die Beeinflussung des diffusen c-Reflexes $(26\bar{7})$ durch die benachbarten b(e)-Reflexe weitgehend zu eliminieren, wurden nur zweidimensionale Intensitätswerte verwendet, die innerhalb des Bereiches $(2,6.5,\bar{7} \geq h, k, l \geq 2,5.5,\bar{7})$ lagen. Für die beiden formalen "Grenz"-Indizes mit $\alpha = 109.4^{\circ}$ und $\alpha = 117.0^{\circ}$ wurden zweidimensionale Intensitätswerte durch lineare Interpolation benachbarter Meßpunkte bestimmt.

Die Ergebnisse des Gauß-Fits sind in Tab. E 2 dargestellt.

Tabelle E 2:
Vergleich von gemessenen und berechneten zweidimensionalen Intensitätswerten am Ort der Stützpunkte

Azimutwinkel $\alpha[^{\circ}]$	zweidimensionale Intensitätswerte $I_{gemessen}$	$I_{berechnet}$	$I_{gem.} - I_{ber.}$
109.4	16.0	12.9	3.1
110.0	17.5	20.2	-2.7
112.0	48.0	49.3	-1.3
114.0	53.0	47.4	5.6
116.0	13.5	17.9	-4.4
117.0	12.0	7.8	4.2

Der R-Faktor, definiert als

$$R = \frac{\sum \left| I_{gem.} - I_{ber.} \right|}{\sum I_{gem.}}$$

betrug hier R = 0.13. Zweifellos ist die Anwendung dieser Fit-Routine nicht unproblematisch, da einer Verfeinerung von in diesem Falle 3 Parametern (Peak-Höhe, Linienbreite, Linienlage) nur 6 Normalengleichungen gegenüberstehen. Dennoch wird dieses Verfahren berechtigt sein, da es sicher genauere Werte liefert als z. B. die Anwendung der Trapezformel. Die Intensität, d. h. die Fläche unter der Gaußkurve errechnete sich zu I = 282.1 Intensitätseinheiten, die Halbwertsbreite im Azimutwinkel betrug $\alpha = 4.9^{\circ}$. Multipliziert man diesen Intensitätswert mit dem Skalierungsfaktor, der die Volumina der verschiedenen Proben aneinanderreicht, erhält man die integrale dreidimensionale Intensität mit I = 221. Dieser Wert ist im Abschnitt 2.5.6., Tab. 9 aufgeführt. Transformiert man die in Einheiten des Azimutwinkels angegebene Halbwertsbreite in Einheiten eines reziproken Vektors, kann man daraus Teilchengrößen entlang der reellen Richtung [010] bestimmen. Man erhält einen Wert von etwa 18 Å. Aus der Anwendung dieses Verfahrens auf alle c-Reflexe ergeben sich jeweils der Zahl der c-Reflexe entsprechende Halbwertsbreiten parallel der reellen Richtung [010]. Der gemittelte Wert ist im Abschnitt 2.5.7., Abb. 14 eingetragen.

Anhang F Tabellen

Tabelle F 1:

Vergleich von gemittelten Tetraederabständen (T – O)

T-Atom	diese Arbeit ($An_{78.6}$) Länge [Å]	Fleet et al. (An_{80}) /13/ Länge [Å]	Kalus (An_{100}) /26/ Länge [Å]
T_1(OOO)	1.627	1.620	1.618
T_1(OzO)	1.726	1.742	1.749
T_1(mOO)	1.706	1.738	1.748
T_1(mzO)	1.619	1.618	1.614
T_2(OOO)	1.702	1.710	1.746
T_2(OzO)	1.624	1.621	1.617
T_2(mOO)	1.622	1.608	1.614
T_2(mzO)	1.721	1.728	1.743

Tabelle F 2:

Strukturfaktoren einiger c-, d-Reflexe.
Die Beiträge der Streuanteile der einzelnen Atomsorten sind getrennt aufgeführt.

Berechnet mit Atomkoordinaten An_{100} (s. Kalus /26/) für Mo-Strahlung.

H	K	L	F_C	A_{Ca}	$A_{Al/Si}$	A_O
- 4	- 6	- 7	-17.32	1.35	-14.71	- 3.96
- 4	4	- 3	-66.79	-49.04	-11.04	- 6.69
- 3	- 7	- 9	25.57	- 2.35	23.20	4.72
- 3	5	- 9	-91.52	-46.29	-20.99	-24.23
- 3	5	- 7	-94.01	-48.08	-19.38	-26.53
- 3	5	- 3	32.11	27.97	3.59	0.54
- 2	6	- 5	51.41	65.94	-11.15	- 3.42
- 1	5	- 3	-67.59	-49.88	- 0.77	-16.93
0	2	-15	65.68	22.50	28.73	14,45
0	6	- 5	-96.02	-75.20	11.04	-31.85
2	6	- 7	51.96	61.97	12.01	-22.04
3	5	-11	92.87	43.17	27.83	21.85
4	- 6	-13	41.70	38.13	7.06	- 3.52
4	2	- 7	-44.09	-64.95	24.36	- 3.47
4	4	-11	58.99	12.98	4.95	41.07
- 2	- 7	- 2	-25.23	-13.75	- 6.79	- 4.69
0	5	- 4	-22.91	-16.54	- 6.28	- 0.08
4	3	-14	-27.73	- 8.53	- 9.95	- 9.25
4	5	-10	25.92	11.27	10.61	4.03

L I T E R A T U R V E R Z E I C H N I S

1. ADLHART W., FREY F., JAGODZINSKI H. X-Ray and Neutron Investigations of the $P\bar{1}$ - $I\bar{1}$ Transition in Pure Anorthite (1979), in Vorb.

2. ADLHART W., FREY F., JAGODZINSKI H. X-Ray and Neutron Investigation of the $P\bar{1}$ - $I\bar{1}$ Transition in Anorthite with Low Albite Content (1979), in Vorb.

3. BAMBAUER H.U., EBERHARD E., VISWANATHAN K. The Lattice Constants and Related Parameters of "Plagioclases (low)" Schweiz. Min. Petr. Mitt. 47, (1967), 351-364

4. BERKING B. Die Verfeinerung der Kristallstruktur eines lunaren Plagioklases An_{90} Z. Krist. 144, (1976), 189-197

5. CHAO S.H., TAYLOR W.H. Isomorphous replacement and superlattice structures in the plagioclase felspars Proc. Roy. Soc. London 176 A, (1940), 76-87

6. CINNAMON C.G., BAILEY S.W. Antiphase Domain Structure Of The Intermediate Composition Plagioclase Feldspars Amer. Min. 56, (1971), 1180-1198

7. McCONNELL J.D.C., FLEET S.G. Direct Electron-optical Resolution of Anti-phase Domains in a Silicate Nature 199, (1963), 586

8. McCONNELL J.D.C. Analysis of the time-temperature-transformation behaviour of the plagioclase feldspars aus /28/, (1974), 460-477

9. McCONNELL J.D.C. Electron-optical study of the fine structure of a schiller labradorite aus /28/, (1974), 478-490

10. CZANK M. Strukturuntersuchungen am Anorthit im Temperaturbereich von 20°C - 1430°C Dissertation Nr. 4976 der ETH Zürich

11. DOMAN R.C., CINNAMON C.G., BAILEY S.W. Structural Discontinuities In The Plagioclase Feldspar Series Amer. Min. 50, (1965), 724-740

12. FERGUSON R.B., TRAILL R.J., TAYLOR W.H. The Crystal Structures of Low-Temperature and High-Temperature Albites
Acta Cryst. 11, (1958), 331-348

13. FLEET S.G., CHANDRASEKHAR S., MEGAW H.D. The Structure of Bytownite ('Body-Centred Anorthite')
Acta Cryst. 21, (1966), 782-801

14. GAY P. The structures of the plagioclase feldspars: VI. Natural intermediate plagioclases
Min. Mag. 31, (1956), 21-40

15. HASHIMOTO H., NISSEN H.-U., ONO A., KUMAO A., ENDOH H., WOENSDREGT C.F. High-resolution Electron Microscopy of Labradorite Feldspar
aus Wenk H.-R.: Electron Microscopy in Mineralogy
Springer Verlag Berlin, Heidelberg, New York, (1976), 332-344

16. HELLNER E. Intensitätsmessungen aus Aufnahmen in der GUINIER-Kamera
Z. Krist. 106, (1954), 122-145

17. JAGODZINSKI H., KOREKAWA M. Supersatelliten im Beugungsbild des Labradorits $(Ca,Na)[(Si,Al)_2O_8]$
Naturwissenschaften 52, (1965), 640

18. JAGODZINSKI H., KOREKAWA M. X-ray investigations of lunar plagioclases and pyroxenes
Proc. Third Lunar Sci. Conf., Geochim. Cosmochim. Acta. Suppl. 3, Vol. 1, (1972), 555-568

19. JAGODZINSKI H., KOREKAWA M. Diffuse X-ray scattering by lunar minerals
Proc. Fourth Lunar Sci. Conf., Geochim. Cosmochim. Acta, Suppl. 4, Vol. 1, (1973), 933-951

20. JAGODZINSKI H., KOREKAWA M. Diffuse Scattering by Domains in Lunar and Terrestrial Plagioclases
Sixth Lunar Sci. Conf., (1975), 429-431
The Lunar Science Institute, NASA, Houston

21. JAGODZINSKI H., KOREKAWA M. Zur Kristallstruktur und Fehlordnung der Plagioklase $Ca_xNa_{1-x}[Al_{1+x}Si_{3-x}O_8]$
Z. Krist. 143, (1976), 239-277

22. JAGODZINSKI H. Order-Disorder Phenomena in Crystal-Structures
Journal de Physique, Colloque C 7, supplément au n° 12, Tome 38, (1977), C 7-42 - C 7-46

23. JAGODZINSKI H., KOREKAWA M. Satellite Reflections of Labradorite
Phys. Chem. Minerals 3, (1978), 69-72

24. JAGODZINSKI H., KOREKAWA M. (1979), in Vorb.

25. JONES F.W. The measurement of particle size by the X-ray method
Proc. Roy. Soc. London 166 A, (1938), 16-43

26. KALUS C. Neue Strukturbestimmung des Anorthits unter Berücksichtigung möglicher Alternativen
Dissertation Universität München (1978)

27. KEMPSTER C.J.E., MEGAW H.D., RADOSLOVICH E.W. The Structure of Anorthite, $CaAl_2Si_2O_8$
I. Structure Analysis
Acta Cryst. 15, (1962), 1005-1017

28. MacKENZIE W.S., ZUSSMAN J. The feldspars
Manch. Univ. Press, New York (1974)

29. KITAMURA M., MORIMOTO N. The Superstructure of Intermediate Plagioclase
Proc. Japan Acad. 51, (1975), 419-424

30. KITAMURA M., MORIMOTO N. Superstructure of Plagioclase Feldspars: A Modulated Coherent Structure of the e-Plagioclase
Phys. Chem. Minerals 1, (1977), 199-212

31. KLEIN S. Satellitenreflexe des Labradorits
Diplomarbeit, Universität München, (1970)

32. KLEIN S., KOREKAWA M. Die gemittelte Struktur des Labradorits
Neues Jahrbuch für Mineralogie, Monatshefte, (1976), 66-69

33. KOREKAWA M., JAGODZINSKI H. Die Satellitenreflexe des Labradorits
Schweiz. Min. Petr. Mitt. 47, (1967), 269-278

34. KOREKAWA M., LAVES F., JAGODZINSKI H. Lunar and terrestrial "two-phase" An-rich plagioclases (abstract)
Acta Cryst. A 28, Suppl., (1972), 73

35. KOREKAWA M., HORST W. Überstruktur des Labradorits An_{52}
Fortschr. Min. 52, Beiheft 2, (1974), 37-40

36. KOREKAWA M., HORST W. Superstructure of labradorite An_{52}
Acta Cryst. A 31, Suppl., (1975), 90

37. KOREKAWA M., HORST W., TAGAI T. Superstructure of Labradorite $An_{\sim 50}$
Phys. Chem. Minerals 3, (1978), 74-75

38. KOREKAWA M., HORST W., TAGAI T. Determination of Superstructure of Labradorite $An_{\sim 50}$
Z. Krist. 149, (1979), 128-130

39. McLAREN A.C., MARSHALL D.B. Transmission Electron Microscope Study of the Domain Structures Associated with the b-, c-, d-, e- and f-Reflections in Plagioclase Feldspars
Contr. Min. Petr. 44, (1974), 237-249

40. LAVES F., GOLDSMITH J.R. On The Superstructure In Anorthite
Amer. Min. 37, (1952), 295

41. LAVES F., GOLDSMITH J.R. Long-Range-Short-Range Order in Calcic Plagioclases as a Continuous and Reversible Function of Temperature
Acta Cryst 7, (1954), 465-472

42. LIPSON H., STEEPLE H. Interpretation of X-Ray Powder Diffraction Patterns
Macmillan London, St. Martin's Press New York (1968), 261

43. LOEWENSTEIN W. The Distribution of Aluminum in the Tetrahedra of Silicates and Aluminates
Amer. Min. 39, (1954), 92-96

44. MACHATSCHKI F. The Structure and Constitution of Feldspars
Centr. Min. Abt. A, (1928), 97-104

45. MEGAW H.D. Notation for Felspar Structures
Acta Cryst. 9, (1956), 56-60

46. MEGAW H.D. Order and disorder
I. Theory of stacking faults and diffraction maxima
Proc. Roy. Soc. London 259 A, (1960), 59-78

47. MEGAW H.D. Order and disorder
II. Theory of diffraction effects in the intermediate plagioclase felspars
Proc. Roy. Soc. London 259 A, (1960), 159-183

48. MEGAW H.D. Order and disorder
III. The structure of the intermediate plagioclase felspars
Proc. Roy. Soc. London 259 A, (1960), 184-202

49. MORIMOTO N., NAKAJIMA Y., KITAMURA M. Direct Observation of the Superstructure of Labradorite by Electron Microscopy
Proc. Japan Acad. 51, (1975), 725-728

50. NISSEN H.-U. Lattice Changes in the Low Plagioclase Series
Schweiz. Min. Petr. Mitt. 49, (1969), 491-508

51. NISSEN H.-U., RYBACH L. Feldspar analysis by neutron activation, in Activation analysis in geochemistry and cosmochemistry
Proc. NATO advanced study Inst., Universitets-forlaget Oslo, (1971), 437-443

52. NISSEN H.-U., CHAMPNESS P.E., CLIFF G., LORIMER G.W. Chemical Evidence for Exsolution in a Labradorite
Nature Phys. Sci. 245, (1973), 135-137

53. NISSEN H.-U. Exsolution lamellae in Plagioclase feldspars: electron microscopy and X-ray microanalysis
Proc. 8th Int. Congress on Electron Microscopy, Canberra 1, (1974), 468-469

54. NISSEN H.-U. Exsolution phenomena in bytownite plagioclases
aus /28/, (1974), 491-521

55. NORD G.L.Jr., HEUER A.H., LALLY J.S. Transmission electron microscopy of substructures in Stillwater bytownites
aus /28/, (1974), 522-535

56. OLSEN A., LILLEBÖ V. Developments in Electron Microscopy and Analysis
New York, Academic Press, (1976), 489-492

57. OLSEN A. Lattice Parameter Determination of Exsolution Structures in Labradorite Feldspars
Acta Cryst A 33, (1977), 706-712

58. PENZKOFER B., JAGODZINSKI H. The Superstructure of Plagioclases
Acta Cryst. A 34, Suppl., (1978), 14

59. PENZKOFER B. A New Type of Satellites in Plagioclases
Fifth Europ. Crystallographic Meeting, Kopenhagen, Collected Abstracts, Abstract Nr. 83-P2-3b, (1979), 231

60. SHELX Crystallographic Programs
University Chemical Laboratory, Cambridge Version (1976), ed. G. Sheldrick.

61. SMITH J.V., RIBBE P.H. Atomic Movements in Plagioclase Feldspars: Kinetic Interpretation
Contr. Min. Petr. 21, (1969), 157-202

62. SMITH J.V. Feldspar Minerals
1. Crystal Structure and Physical Properties
Springer Verlag Berlin, Heidelberg, New York, (1974)

63. SMITH J.V. Feldspar Minerals
2. Chemical and Textural Properties
Springer Verlag Berlin, Heidelberg, New York, (1974)

64. SMYTH J.R. Intracrystalline cation order in a lunar crustal troctolite
Proc. Sixth Lunar Sci. Conf., Geochim. Cosmochim. Acta, Suppl. 6, Vol 1, (1975), 821-832. (Atomparameter siehe /21/)

65. TAGAI T., JOSWIG W., KOREKAWA M., WENK H.R.
Kristallographische Untersuchung über Huttenlocher Entmischung im Plagioklas
Z. Krist. 146, (1977), 111 und pers. Mitt.

66. TAYLOR W.H. The Structure of Sanidine and Other Felspars
Z. Krist. 85, (1933), 425-442

67. TAYLOR W.H., DARBYSHIRE J.A., STRUNZ H. An X-Ray Investigation of the Felspars
Z. Krist. 87, (1934), 464-498

68. TOMAN K., FRUEH A.J. On the Origin of Plagioclase Satellite Reflections
Acta Cryst. B 27, (1971), 2182-2186

69. TOMAN K., FRUEH A.J. Intensity Averages of Plagioclase Satellites: Distribution in Reciprocal Space
Acta Cryst. B 28, (1972), 1657-1662

70. TOMAN K., FRUEH A.J. The Intensities and Fourier Transforms of Difference Reflections
Acta Cryst. A 29, (1973), 121-127

71. TOMAN K., FRUEH A.J. Patterson Function of Plagioclase Satellites
Acta Cryst. A 29, (1973), 127-133

72. TOMAN K., FRUEH A.J. Modulated Structure of an Intermediate Plagioclase
I. Model and Computation
Acta Cryst. B 32, (1976), 521-525

73. TOMAN K., FRUEH A.J. Modulated Structure of an Intermediate Plagioclase
II. Numerical Results and Discussion
Acta Cryst. B 32, (1976), 526-538

74. WAINWRIGHT J.E., STARKEY J. A refinement of the structure of anorthite
Z. Krist. 133, (1971), 75-84

75. WARREN B.E. A Simplified Derivation of the Laue Particle Size Equation
Z. Krist. 99, (1938), 448-452

Ich danke Herrn Prof. Dr. H. Jagodzinski für die Anregung zu dieser Arbeit, für sein stetes Interesse während ihrer Durchführung und viele klärende Diskussionen.

Bei meinen Kollegen Dr. C. K. Kalus, Dr. W. Adlhart und M. Peterat bedanke ich mich für viele hilfreiche Gespräche und Hinweise.

Fräulein I. Oppermann half mir bei der Anfertigung von Röntgenaufnahmen. Fräulein A. Schmid und S. Benker fertigten mit großer Sorgfalt die Zeichnungen an. Herr Z. Gappa übernahm die photographische Reproduktion der Bilder. Ihnen danke ich herzlich.

Das Leibniz-Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften gewährte mir erhebliche Mengen an Rechenzeit.

Dieses Projekt wurde durch Mittel der Deutschen Forschungsgemeinschaft (Ja 15/32) gefördert.

Lebenslauf

von	Benno Penzkofer, geboren am 17.9.1947 in München.
Eltern:	Benno Karl Penzkofer und Berta Penzkofer, geb. Jungwirth.

Schule:

1953-1958	Volksschule an der Weissenseestraße in München.
1958-1968	Albert-Einstein-Gymnasium in München mit Abschluß der Hochschulreife.

Studium:

1968-197o	Studium der Physik an der Technischen Universität München.
197o-1974	Studium der Mineralogie an der Universität München.
1974	Diplomprüfung und Abschluß der Diplomarbeit am Institut für Kristallographie und Mineralogie mit dem Thema: "Untersuchung von umwegangeregten Reflexen im Rahmen der kinematischen Theorie".

Hochschultätigkeit:

1974-1975	Wissenschaftliche Hilfskraft am Institut für Kristallographie und Mineralogie der Universität München.
1975-1979	Wissenschaftlicher Angestellter am Institut für Kristallographie und Mineralogie der Universität München.
ab Herbst 74	Anfertigung der vorliegenden Dissertation unter Leitung von Prof. Dr. H. Jagodzinski.